

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**  
**Departamento de Física Teórica I**



**CRECIMIENTO COHERENTE DE  
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS DE  
BAJA DIMENSIONALIDAD**

**MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR  
PRESENTADA POR**

**Silvia Noemí Santalla Arribas**

Bajo la dirección de la doctora  
Rosa María de la Cruz Fernández

**Madrid, 2009**

• **ISBN: 978-84-692-0146-6**

**©Silvia Noemí Santalla Arribas, 2008**

# Crecimiento coherente de heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad

Memoria para optar al grado de doctora en Ciencias Físicas por la aspirante

**Silvia Noemí Santalla Arribas**

dirigida por la doctora

**Rosa María de la Cruz Fernández**









# Índice

## PREFACIO

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad	1
1.2 Interés tecnológico	3
1.3 Modos de crecimiento de heteroestructuras	3
1.4 Técnicas de obtención de heteroestructuras	4
1.5 Aproximaciones teóricas	5
1.6 Plan del trabajo	10
2. BASES DEL MODELO ELÁSTICO CONTINUO	11
2.1 Geometría de un cuerpo deformado	11
2.2 Tensor de deformaciones	14
2.3 Densidad de energía elástica	15
2.4 Simetrías del tensor de constantes elásticas	17
2.5 Efecto de la orientación del cristal en la energía elástica	19
2.6 Tensor de tensiones	21
2.7 Energía superficial	23
2.8 Energía total de un sólido deformado	23
2.9 Expresión del vector desplazamiento	24
3. APROXIMACIÓN DE CAMPO MEDIO	27
3.1 Introducción	27
3.2 Energía elástica de la película y el sustrato deformados	28
3.3 Desajuste efectivo de la película y el sustrato	30
3.4 Energía superficial de la heteroestructura	31
3.5 Energía total de la heteroestructura en aproximación de campo medio	32
3.6 Transición de fase	33
3.7 Publicaciones	35
4. MINIMIZACIÓN EXACTA DE LA ENERGÍA ELÁSTICA	37
4.1 Introducción	37
4.2 Parámetro de red en aproximación de campo medio	38
4.3 Publicaciones y trabajos futuros	40
5. ENFOQUE SEMIATOMÍSTICO	41
5.1 Introducción	41
5.2 Potenciales anarmónicos entre los átomos de la película	42
5.3 Extensión vertical del modelo de Frenkel-Kontorova unidimensional	42
5.4 Diagrama de fases del modelo de FK verticalmente extendido	44
5.5 Publicaciones y trabajos futuros	47
CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO	49
BIBLIOGRAFÍA	51
PUBLICACIONES	53



---

## Prefacio

---

### SOBRE ESTA TESIS

Si estas líneas estás leyendo –y permíteme tutearte–, es por dos posibles motivos: placer u obligación. A los posiblemente escasos lectores del primer tipo les agradezco el esfuerzo y les animo a que me den sus comentarios. A los segundos espero ofrecerles un texto agradable de leer tanto en forma como en contenido.

Dicho contenido es el resultado de  $n$  años de investigación en el departamento de Física de la Universidad Carlos III de Madrid y sobre él no me extenderé dado que es el trabajo que presento.

Sobre la forma sí que quiero hacer algún comentario. Lo que tienes entre las manos, o en la pantalla del ordenador, es una memoria de tesis en *formato publicaciones*. ¿Qué significa eso? La memoria está compuesta por dos partes. En la primera, escrita en castellano, introduzco el tema de investigación, así como las técnicas y métodos usados para resolver los problemas que abordamos y las conclusiones más importantes a las que se ha llegado. Esta parte es, o pretende ser, general y rigurosa. En la segunda parte se incluye el texto íntegro de las publicaciones a las que ha dado lugar la investigación. Mi idea es que una primera lectura debería centrarse en la primera parte y, sólo en caso de un interés más profundo y especializado se debería acudir a la segunda.

Y, ¿qué sería una memoria de tesis sin sus correspondientes agradecimientos?

### AGRADECIMIENTOS

Como ya he dicho antes, el trabajo al que ha dado lugar esta memoria ha sido realizado en la Universidad Carlos III de Madrid, que a partir de ahora denotaré como *charlie*, y bajo la paciente supervisión de la profesora Rosa María de la Cruz. A ella quiero agradecerle que me pusiese en tratos con semiconductores y heteroestructuras, ajenos a mí antes de mi llegada a Leganés, y con los que he compartido muy buenos momentos –y otros no tan buenos.



En *n* años en la *charlie*, como bien te puedes imaginar, no he tratado sólo con mi directora. Mucha gente de este y otros departamentos han pasado por mi vida, y espero que se queden. No, me niego a dar listados de nombres, que seguro que resultan incompletos –aunque sé que es una vieja artimaña. Así que los dividiré en tres grandes grupos, y quien estas líneas lea sabrá donde ubicarse: *cueva y aledaños*, *planta noble* y *resto del campus*.

Pese a estar realizada en la *charlie*, esta tesis será defendida ante el departamento de Física Teórica I de la Universidad Complutense de Madrid, *complu* a partir de ahora. De allí, tengo que reconocer, han salido la mayor parte de los amigos que sé que no van a desaparecer ya de mi vida, si después de tantos años aún no lo han hecho. Pero no es a ellos a los que me quiero referir aún. Ahora deseo aludir a esos *jovenzuelos*, y alguno no tanto, con los que no he compartido las aulas, y a los que he conocido después de que yo saliese de la casa. Sí, sois vosotros, y sé que alguno de entre los que estoy pensando tendrá que coger el puntero, tal y como yo recogí el último que se lanzó.

Sí, ya llego a vosotros, hemos pasado tantas cosas juntos que es difícil recordar cómo nos conocimos. Y tampoco importa. Creo que me habéis aguantado bastante, preguntando continuamente por las evoluciones de *la niña* entre cerveza y cerveza.

Aún me queda mi familia. Nombrados quedáis. Espero que consideréis que la espera ha merecido la pena.

Me falta un nombre, y éste no se me olvida ni le pienso omitir. Quiero agradecer a Javi por estar a mi lado, y por confiar en mí, y por saber la cantidad de veces que no se me puede tomar en serio, y por darme el empujón apropiado para seguir y... bueno, el resto se lo digo a él fuera de estas páginas.

Pensandolo mejor, a mi también me hace ilusión ver mi nombre. Gracias a Agustín, Alberto, Andreas, Ángel, Antonio, Carlos, Carmen, Charo, Clement, Dani, Domingo, Elena, Felipe, Isabel, Ivan Nicolás, Jacobo, Javi, Jesús, José Ángel, José Luis, José María, José Pedro, Joseph Louis, Juan, Juan Carlos, Justi, Leonhard, Lev Davidovich, Lyubomir, Lola, Loreto, Lourdes, Luz, Marcos, Marian, María Jesús, Marta, Miguel, Miguel Ángel, Miriam, Nacho, Paco, Pedro, Pique, Ramón, Raquel, Richard, Robert, Rosa, Samuel, Tatyana, Vane, Víctor, Yakov Il'ich...

Dicho todo esto, sólo queda que pases la página y te sumerjas en la lectura de esta tesis. Nos vemos al acabar.

Silvia Noemí Santalla Arribas  
Septiembre 2007

---

# 1. Introducción

---

## 1.1 Heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad

En 1973 Leo Esaki obtuvo el premio Nobel por su contribución al desarrollo de dispositivos electrónicos semiconductores que empleaban el *efecto túnel*. Dichos dispositivos fueron creados empleando una tecnología de reciente desarrollo: la epitaxia de haces moleculares (*Molecular Beam Epitaxy*, MBE) [ESA 73].

La idea, publicada en 1970 por Esaki y Tsu, fue el crecimiento, mediante capas sucesivas de unas decenas de Åmstrongs de espesor, de una estructura de super-red cuasi-unidimensional. Cuando la diferencia de potencial establecida hace a la energía de los electrones entrar en resonancia con la estructura, la transmitividad del dispositivo es elevada y, por tanto, también la intensidad de la corriente que la atraviesa. Al incrementar dicha diferencia de potencial, la energía de los electrones deja de estar en resonancia y la intensidad decae. Este fenómeno, de notable interés tecnológico, se conoce como *resistencia diferencial negativa* [ET 70].

Dicha contribución, que es uno de los primeros ejemplos de un fenómeno cuántico a escala macroscópica, no hubiera sido posible sin el rápido desarrollo de las técnicas de crecimiento cristalino controlado que se desarrollaron a lo largo de los años 60.

El término *epitaxia* (del griego “*epi*”, superficie, y “*taxis*”, orden) denota el crecimiento sobre un cristal de una nueva capa de material que adopte, en la intercara, la misma estructura cristalina. Si la capa es del mismo material, se denomina *homoepitaxia*, y si es un material diferente, *heteroepitaxia*. Las técnicas más empleadas hoy en día son la deposición química en fase vapor (*Chemical Vapor Deposition*, CVD) y la epitaxia de haces moleculares (MBE). Esta última permite la deposición de capas atómicas una a una (ALMBE).

Mediante dichas técnicas se pudieron explorar las primeras *heteroestructuras de baja dimensionalidad*, las super-redes (*superlattices*) y los pozos cuánticos (*quantum wells*), a lo largo de los años 70 y 80. En estos últimos, los electrones están confinados a moverse en un plano. El momento en la dirección transversal al pozo,  $k_z$ , está cuantizado y sólo puede tomar valores en  $n\pi/L_z$ , donde  $L_z$  es la anchura del mismo. Suponiendo que los electrones son libres dentro del pozo, su energía vendrá dada por la expresión  $E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ , donde  $k_x$  y  $k_y$  pueden tomar cualquier valor. De esta manera, la densidad de estados como función de la energía vendrá dada como la suma de una contribución por cada posible valor de  $k_z$ . La figura 1.1 muestra la densidad de

estados electrónicos con diferentes confinamientos. Los saltos finitos en la densidad de estados de los pozos cuánticos (2D) frente a la forma continua de los electrones libres (3D) son la clave de sus aplicaciones tecnológicas [DWH 74].

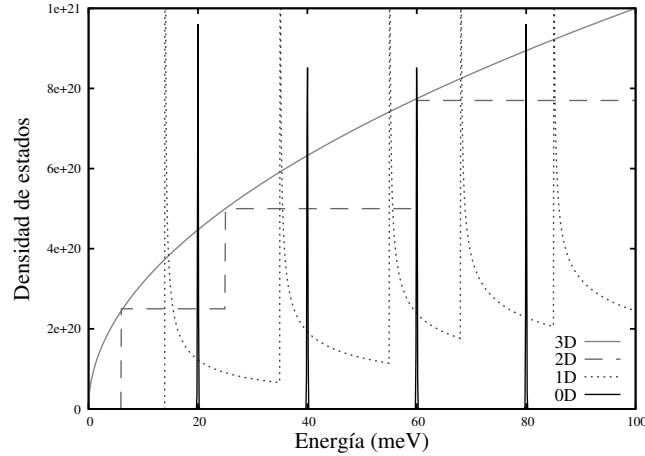


FIGURA 1.1. Densidad de estados de los electrones en distintos dispositivos. La línea continua gris claro marca los electrones libres con movimiento en todo el espacio (3D). La línea a trazos indica los saltos que da la densidad de estados de los electrones en un pozo cuántico (permite el movimiento libre en 2D). La línea punteada se refiere a hilos cuánticos, donde los electrones sólo tienen un grado de libertad. Por último, la línea oscura continua denota el espectro discreto de los electrones en un punto cuántico (0D) [HEP].

A finales de los años 80 los pozos cuánticos y las super-redes eran dispositivos bien establecidos. La mejora en las técnicas de crecimiento epitaxial permitió el desarrollo de heteroestructuras de dimensión menor. Los *hilos cuánticos* (*quantum wires*) son estructuras en las que los electrones están confinados a moverse en una única dimensión espacial [KHB 89]. De esta manera, dos de las componentes del momento están cuantizadas:  $k_x = n_x \pi / L_x$ ,  $k_y = n_y \pi / L_y$ .

Un *punto cuántico* (*quantum dot*, QD) es una estructura en la que los electrones están confinados en las tres direcciones espaciales. Por lo tanto, los estados permitidos están completamente discretizados y los niveles de energía están cuantizados. Se comportan, por tanto, como “átomos artificiales” donde los saltos energéticos están dictados por el tamaño del mismo.

Ya en 1932, Rocksby [Roc 32] insertó impurezas de CdSe en una matriz de vidrio, que formaban microcristales con una frecuencia de absorción óptica muy bien definida, funcionando como filtros de color. En 1984, Ekimov y Onushenko [EO 84] confirmaron que dichos microcristales presentaban efectos de confinamiento cuántico. El concepto de punto cuántico aparece en el trabajo de Arakawa y Sakaki en 1982 [AS 82], que predijeron teóricamente la posibilidad de crear láseres con puntos cuánticos. Hoy en día, dichos láseres son parte habitual de muchos dispositivos de electrónica doméstica (lectores de DVD).

Las posibilidades tecnológicas de los puntos cuánticos y otras heteroestructuras de baja dimensionalidad son descritas en la siguiente sección, mientras que en la sección 1.3 discutimos los distintos modos de crecimiento. El apartado 1.4 describe los procesos físicos y químicos mediante los cuales se generan los puntos cuánticos en el laboratorio y en la industria. Las dificultades teóricas a las que conduce la modelización de la formación de estas estructuras son analizadas brevemente en la sección 1.5. Por último, este capítulo finaliza con un breve resumen del contenido de la tesis.

## 1.2 Interes tecnológico

La importancia tecnológica de este tipo de estructuras ha sido avalada por la comunidad científica en repetidas ocasiones, desde el premio Nobel de Esaki en 1973 hasta el concedido a Alferov y Kroemer en el año 2000 [ALF 01].

Las aplicaciones de los puntos cuánticos están basadas en su naturaleza cuasi-atómica, es decir: se comportan como átomos artificiales, con niveles de energía bien definidos.

El espectro de un punto cuántico está directamente relacionado con su tamaño  $L$ . Con una misma geometría, la frecuencia más baja de absorción escala con  $L^{-2}$ . De esta manera, si es posible controlar el tamaño de los puntos cuánticos, es también posible controlar sus frecuencias de resonancia. Constituye, por tanto, una forma de desarrollar láseres que trabajan en el azul.

Ya con pozos cuánticos fue posible el desarrollo de diodos láser, conocidos como *láseres de cascada*. El paso de pozos cuánticos a puntos cuánticos, con las mejores condiciones del espectro, mejoraron sensiblemente las propiedades de dichos láseres.

Las propiedades ópticas de los puntos cuánticos han llevado a considerar su utilidad en conversión fotovoltaica de la energía solar. Schaller y Klimov, en 2004, han publicado sobre la alta eficiencia en la multiplicación de los portadores en nanocristales de PbSe [SK 04].

Asimismo, se ha propuesto su utilización como trazadores en biología y medicina, debido a su respuesta óptica bien delimitada [BSN 04].

Una de las áreas de aplicabilidad más prometedores es el campo de la computación cuántica [GMD 02]. Si los electrones en puntos cuánticos vecinos están en estados “entrelazados” (*entangled*), debido a sus buenas propiedades de confinamiento, sería posible considerarlos como *qubits* y realizar operaciones sobre ellos sin decoherencia. De esta manera, usando puntos e hilos cuánticos, se podría implementar un computador cuántico real.

## 1.3 Modos de crecimiento de heteroestructuras

El crecimiento epitaxial, como se dijo anteriormente, consiste en la formación de una película sobre un sustrato cristalino, de manera que, en la intercara, las estructuras cristalinas coincidan. El crecimiento se denomina *homoepitaxial* cuando la película y el sustrato son del mismo material, y *heteroepitaxial* cuando son de materiales diferentes.

El crecimiento heteroepitaxial puede tener lugar dentro de los siguientes modos. Si la película crece siempre plana, capa sobre capa, se dice que el modo de crecimiento es de *Frank-van der Merwe* (FvdM) [FvdM 49]. Si la película forma *islas* tridimensionales sin llegar a cubrir o *mojar* del todo el sustrato, se dice que el modo es de Volmer-Weber (VW) [VW 26]. Existe un modo de crecimiento mixto, en el cual la película cubre completamente el sustrato en la fase inicial con lo que se conoce como una *capa mojada* (*wetting layer*) plana. Si se añade más material de la película, ésta forma estructuras tridimensionales. Este tipo de crecimiento recibe el nombre de *Stranski-Krastanov* (SK) [SK 37] (ver figura 1.2).

La pregunta relevante en términos físicos es determinar la razón por la que distintas heteroestructuras crecen según los diferentes modos citados previamente. Existen, en esencia, dos parámetros físicos que determinan el crecimiento:

- a. El desajuste de parámetros de red (*lattice mismatch*), que provoca tensiones elásticas en los dos materiales.

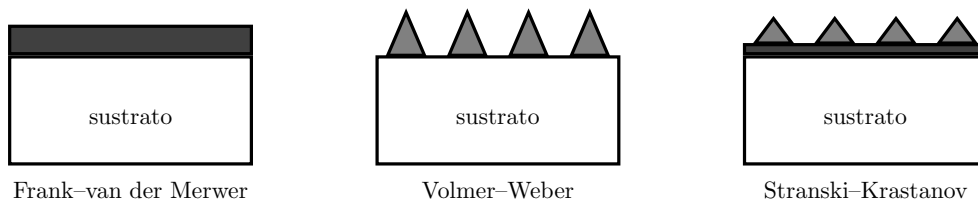


FIGURA 1.2. Tres modos de crecimiento de heteroestructuras. Capa sobre capa o Frank-van der Merwe, crecimiento directo de islas o Volmer-Weber y crecimiento de islas después de una capa mojada o Stranski-Krastanov.

b. Las distintas tensiones superficiales del sustrato y la película, así como la energía de la intercara.

Si no existe diferencia entre los parámetros de red de los materiales, el tipo de crecimiento está dictado por las tensiones superficiales de la película ( $\gamma_p$ ), el sustrato ( $\gamma_s$ ) y la intercara ( $\gamma_i$ ). Si la suma de las contribuciones de la película e intercara es menor que la energía superficial del sustrato,  $\gamma_p + \gamma_i < \gamma_s$ , la configuración de mínima energía será aquella en la que éste quede completamente cubierto por la película y crecerá plana (modo de crecimiento de FvdM). Si, por el contrario,  $\gamma_p + \gamma_i > \gamma_s$ , el crecimiento más propicio energéticamente será la formación de islas directamente sobre el sustrato, minimizando así la extensión de la intercara y aumentando la energía superficial debida a la película. Se trata del modo de crecimiento de VW [SB 99].

La tensión superficial depende, en general, de la orientación de la cara expuesta. De este modo, es concebible el desarrollo de un modo de crecimiento SK sólo mediante el balance energético de tensiones superficiales [GLSD 04].

Si la energía de intercara es pequeña, de manera que la primera capa de la película cubre totalmente el sustrato, y hay diferencia entre los parámetros de red de los dos materiales, los mecanismos que determinan el comportamiento de la heteroestructura se hacen más complejos.

Tanto el sustrato como la película, en este caso, desarrollan tensiones debido al desajuste entre los parámetros de red. Estas tensiones elásticas pueden ser relajadas mediante la formación de estructuras tridimensionales sobre la capa mojada (*wetting layer*), es decir: el desarrollo de un modo de crecimiento SK. Estas rugosidades pueden ser inhibidas debido a la tensión superficial de la película. Si ésta es muy elevada, el modo de crecimiento puede aún ser capa-sobre-capas, o FvdM [GLSD 04].

Para grandes diferencias entre parámetros de red, la relajación de las tensiones elásticas también puede tener lugar de forma *plástica*, es decir, mediante la creación de una serie de defectos en la estructura cristalina. En este caso, se dice que el crecimiento no es *coherente* generándose *dislocaciones de desajuste* (*misfit dislocations*).

## 1.4 Técnicas de obtención de heteroestructuras

Las técnicas más comúnmente empleadas para el crecimiento epitaxial de capas delgadas son el *sputtering*, la *deposición química en fase vapor* y la *epitaxia por haces moleculares*.

El *sputtering* es un proceso mediante el cual, en una cámara de vacío, se bombardea una fuente de material con iones de alta energía. De esta manera, los átomos que están en la superficie de la fuente salen despedidos y, mediante campos electromagnéticos, son guiados hasta que se depositan sobre el sustrato deseado. Como principal ventaja está la de su alta velocidad de proceso, lo que

reduce la deposición de impurezas. La composición estequiométrica de la película coincide siempre con la de la fuente de material, incluso si se trata de una aleación compleja. La razón radica en el hecho de que, si bien algunos tipos de átomos serán despedidos con más frecuencia que otros, estas diferencias se verán compensadas por una menor presencia en la fuente de este tipo de átomos.

La *deposición química en fase vapor* (*Chemical Vapor Deposition*, CVD) es una técnica mediante la cual unos determinados *precursores* químicos, que luego darán lugar a las moléculas que constituirán la película, son liberados en forma de vapor en las cercanías del sustrato. Allí se produce la reacción química necesaria y el compuesto resultante precipita, formando la película. Una de las variantes más empleada para el crecimiento epitaxial de semiconductores es la conocida como CVD metalo-orgánica (MOCVD), en la que los precursores son compuestos orgánicos de los elementos considerados. Su principal ventaja radica en que el proceso no se realiza en vacío, sino a presiones moderadas.

La *epitaxia por haces moleculares* (*Molecular Beam Epitaxy*, MBE), es actualmente la técnica más empleada para el crecimiento de puntos cuánticos. En ella, se hacen converger sobre el sustrato haces lentos de átomos de los materiales correspondientes, permitiendo la deposición de las capas atómicas una a una. Este proceso permite el crecimiento más puro, con un control exhaustivo de la composición química de la película.

Cada uno de los componentes químicos de la película se encuentra en forma sólida en una *célula de efusión*. Allí se calientan y se generan unos flujos cuyas intensidades están determinadas por la temperatura de cada celda. La composición de la película es estimada en tiempo real (midiendo la temperatura de la muestra) y este dato es gestionado por ordenador para regular las temperaturas de cada célula. La MBE debe ser realizada en una campana de alto vacío. A cambio, presenta la ventaja de poder cerrar el flujo de cualquiera de las componentes de manera rápida.

Las técnicas de crecimiento heteroepitaxial antes descritas pueden dar lugar a puntos cuánticos auto-organizados, si los parámetros físicos son los apropiados, según el modo de crecimiento de Volmer-Weber o Stranski-Krastanov. Los principales problemas a la hora de emplear estos puntos cuánticos en aplicaciones consiste en la no uniformidad de sus tamaños, distribución y geometrías. Además, pueden generarse otras estructuras, como hilos cuánticos.

Otra manera de producir puntos cuánticos es mediante el empleo de *técnicas litográficas*. En ellas se genera una estructura heteroepitaxial plana (pozo cuántico) y se la somete a un ataque químico diferencial (*etching*). El tamaño más pequeño al que se puede acceder de esta forma está en torno a los 25 nm [BV 01], y el principal inconveniente es que los puntos cuánticos generados tienen gran cantidad de defectos en los bordes. A cambio, aparecen ordenados espacialmente y con tamaños uniformes.

La teoría desarrollada en esta tesis no es aplicable a los puntos cuánticos generados mediante técnicas litográficas, sino tan sólo a los puntos cuánticos auto-organizados generados mediante crecimiento heteroepitaxial de materiales con parámetros de red desajustados.

## 1.5 Aproximaciones teóricas

En esta tesis se desarrollan algunos modelos teóricos para el estudio de la transición de fase 2D-3D, en el modo de crecimiento Stranski-Krastanov, que pueden sufrir las heteroestructuras como resultado del desajuste entre los parámetros de red del sustrato y la película.

A continuación introduciremos de manera intuitiva el tipo de problema físico con el que nos enfrentamos. Considérese el sustrato como una red de átomos unidos mediante muelles de una determinada longitud natural (es decir, parámetro de red; ver figura 1.3A cadena inferior). Sobre este sustrato se deposita una capa de material correspondiente a la película. Sus átomos están unidos por muelles cuya longitud natural es algo mayor (figura 1.3A cadena superior). Si el crecimiento es coherente los átomos de la película se sitúan en las posiciones designadas por el sustrato aunque la película tenga que comprimirse (ver figura 1.3B)

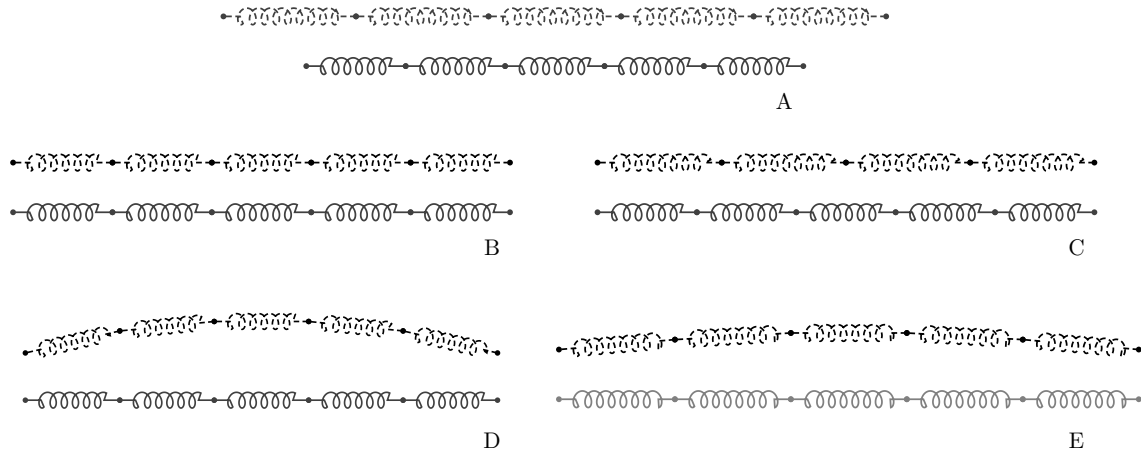


FIGURA 1.3. A. Dos cadenas atómicas de diferente longitud natural. B. Deformación de la cadena que representa la película para adaptarse coherentemente al sustrato. C. Adaptación de la película al sustrato permitiendo defectos. D. Crecimiento coherente, i.e.: sin defectos, manteniendo el sustrato rígido pero curvándose la película en la dirección de crecimiento. E. Crecimiento coherente 3D con sustrato no rígido: una ligera deformación del sustrato reduce la curvatura de la película.

Si la cadena que forma la película no mantiene el número de átomos que tendría en caso de que se tratase de homoepitaxia, el crecimiento no es coherente y se crean defectos (ver figura 1.3C).

Volviendo al crecimiento coherente, los muelles de la película están comprimidos. Por tanto, la estructura está sometida a altas tensiones elásticas. Una de las posibles maneras de relajarlas es curvando sus capas superiores o mediante la formación de islas (ver figura 1.3D). Estas islas son los precursores de los puntos cuánticos.

Como es natural, es razonable esperar que la tensión no sólo afecte a la película, sino que también el sustrato se vea sometido a ella. En nuestro trabajo tendremos en cuenta este efecto, que en general retarda la formación de las estructuras tridimensionales (ver figura 1.3E).

El problema físico planteado se puede estudiar desde varios puntos de vista. Por un lado, podemos analizar los aspectos *cinéticos* o los de *equilibrio* del mismo. Ambos aspectos pueden ser considerados desde una perspectiva *atómica* o *continua*, o incluso mediante una combinación de ambas.

El análisis de equilibrio tiene como objetivo fundamental la búsqueda de las configuraciones de la heteroestructura que minimizan la energía total de la misma. Es preciso tener en cuenta tanto la *energía elástica*, debida a la deformación volumétrica de la película y del sustrato, como la *energía superficial*, que da cuenta del coste energético de la creación de una nueva superficie libre en el extremo superior de la película.

Si el crecimiento es 2D (es decir, plano o capa sobre capa), no hay una contribución extra de la energía superficial. En cambio, si la superficie se vuelve rugosa, el área de la superficie externa es mayor. Este incremento en superficie libre conlleva un coste energético, debido a la mayor cantidad de enlaces rotos entre los átomos de la película. La energía superficial es proporcional al exceso de área. Por supuesto, la constante de proporcionalidad,  $\gamma$  dependerá de la orientación de la cara expuesta, así como de la configuración que adopten los átomos de la superficie. En general, la obtención a partir de primeros principios de esta constante es un problema complejo que se conoce como de *reconstrucción superficial*. En este trabajo asumiremos que dicho coeficiente es conocido, bien por cálculos en base a primeros principios o de manera experimental.

El análisis *continuo* del problema estático se basa en el empleo de la *teoría elástica continua*, una de las primeras teorías clásicas de campos en ser desarrollada [LL 86]. En este enfoque, el campo fundamental es la medida de la deformación, que viene representada mediante un campo tensorial de segundo orden. La energía es un funcional no lineal de dicho campo. La información sobre el material está contenida en un conjunto de parámetros: las *constantes elásticas*, definidas, a orden más bajo, por un tensor de orden cuatro. Para llevar a cabo la minimización del funcional de energía se pueden utilizar distintos tipos de técnicas: resolución de las *ecuaciones de Euler-Lagrange* asociadas, métodos de minimización multidimensional clásicos, etc. Este enfoque continuo es el empleado mayoritariamente en este trabajo.

Las estructuras cristalográficas se tienen en cuenta a partir del conocimiento de las constantes elásticas. Los análisis continuos de este problema realizados con anterioridad [BR 00] asumían que los materiales analizados eran *isótropos*. Esta aproximación está bastante alejada de la realidad: la mayoría de los materiales semiconductores tienen enlaces atómicos de alta direccionalidad, normalmente con estructura de diamante o zinc-blenda. Por tanto, es preciso estudiar la estructura completa del tensor de constantes elásticas. Asimismo, otro aporte original de esta tesis es el estudio de los efectos de un cambio de orientación del sustrato en el crecimiento de la heteroestructura. Para dar cuenta de este cambio es preciso estudiar la transformación del funcional de energía, mediante el cambio efectivo en el tensor de constantes elásticas.

Analizar el problema estático desde un punto de vista atomístico implica encontrar la configuración de equilibrio de un conjunto de átomos sometidos a unas interacciones realistas. En la imagen presentada al principio de esta sección, dicha interacción se daba en base a unos “muelles”, presumiblemente armónicos, que unían los próximos vecinos. La situación real es de una complejidad mucho mayor.

El primer enfoque posible para estudiar el problema estático desde un punto de vista atomístico es el conocido como el *campo de fuerzas de valencia* (*Valence Force Field*, VFF) [MAR 70]. No se trata de un enfoque en base a primeros principios, sino que se obtiene una determinada forma para la interacción atómica y los parámetros libres son fijados empleando los valores experimentales de las constantes elásticas. Como es esperable, este enfoque está fuertemente ligado al análisis continuo. Aun así, la inclusión de interacciones realistas está limitada por el número de constantes elásticas independientes que es posible medir.

Un análisis atomístico en base a primeros principios (cálculos *ab initio*) es asequible en la medida en la que es posible encontrar la energía de una configuración arbitraria de los átomos de la película y el sustrato. Obtener dicha energía es un problema formidable de mecánica cuántica, que sólo resulta factible en base a aproximaciones. La más notable de éstas es la *teoría del funcional densidad* (*Density Functional Theory*, DFT). Esta teoría se basa en el empleo de un teorema exacto de mecánica cuántica, el *teorema de Kohn-Sham* [BUR 03], según el cual, la energía del estado fundamental de un conjunto de electrones bajo condiciones muy generales es un funcional universal que depende, tan sólo, de la densidad electrónica total. Desafortunadamente, la forma



exacta de dicho funcional universal es desconocida, y sólo se dispone de aproximaciones parciales. Aun así, los resultados de dicha aproximación son muy buenos en un número muy amplio de aplicaciones, entre las que se cuentan la estructura de materiales semiconductores como los que analizamos en esta tesis.

Desafortunadamente, aun empleando la aproximación considerada en DFT, la obtención del estado de equilibrio es una tarea compleja, debido al número de átomos involucrados. Un enfoque alternativo consiste en emplear resultados de DFT obtenidos mediante un número pequeño de átomos para establecer cuál es la interacción efectiva entre los distintos tipos de átomos y después utilizar un modelo simplificado como, por ejemplo, el *modelo de Frenkel-Kontorova* (FK) [BK 04]. En este modelo, los átomos de la película se depositan sobre un potencial fijo que representa al sustrato, y están enlazados entre ellos mediante una interacción efectiva que, en el caso más simple, es tan sólo un muelle armónico. De esta manera, se combinan las ventajas del análisis *ab initio* proporcionado por DFT y el empleo de un modelo efectivo que permite considerar un número elevado de átomos, e incluso estudiar el límite termodinámico. Por supuesto, los parámetros de la interacción también pueden obtenerse mediante otros enfoques, como VFF.

Normalmente, los modelos de equilibrio no tienen en cuenta de manera explícita los efectos de la *temperatura*. En general, ésta entra de manera indirecta, a través de la modificación efectiva de las constantes elásticas y los parámetros que determinan la tensión superficial. En rigor, no es la energía total lo que es preciso minimizar, sino la *energía libre de Helmholtz*.

El enfoque *cinético* del problema del crecimiento epitaxial es necesario cuando la velocidad de deposición de las partículas impide el establecimiento de una configuración de equilibrio. El objetivo de este enfoque es la obtención de las propiedades estadísticas de la *configuración estacionaria* [PGMPV 00].

Al contrario que en el caso de equilibrio, el comportamiento no depende sustancialmente de los detalles de la interacción interatómica. En efecto, los procesos están comprendidos en diversas *clases de universalidad* bien definidas. Por tanto, es usual emplear modelos altamente simplificados en su definición, pero que dan origen a una gran complejidad en el comportamiento. Describiremos brevemente los dos tipos básicos de modelos: atomísticos y continuos.

Los modelos más básicos para analizar los procesos cinéticos de crecimiento son los *atomísticos*. Un modelo que resulta al mismo tiempo sencillo e interesante es la agregación limitada con difusión (*Diffusion Limited Aggregation*, DLA) [BS 95], donde los átomos son liberados de uno en uno, siguiendo un camino aleatorio hasta que colisionan con la superficie, agregándose a ella y quedando fijada su posición. La figura 1.4 muestra una configuración típica DLA, con clara geometría fractal.

Otros modelos, más sofisticados, tienen en cuenta otros factores, como la movilidad de los átomos adsorbidos, la preferencia de éstos por las posiciones de la superficie en las que hay muchos enlaces abiertos y cierta probabilidad de desorción. La mayoría de los modelos operan sobre una red (*lattice*) computacional, de manera similar al modelo *solid-on-solid* para equilibrio, en las que cada celda puede estar tan sólo ocupada o vacía, con ciertas reglas probabilísticas de transformación. Otros modelos, más sofisticados, prescinden de dicha red (*off-lattice*).

El modelo *continuo* más ampliamente estudiado para el estudio de procesos cinéticos de crecimiento es el dado por la ecuación de *Kardar-Parisi-Zhang* (KPZ):

$$\partial_t h(x, y) = \nu \nabla^2 h(x, y) + \nu_2 \nabla^4 h(x, y) + \lambda |\nabla h(x, y)|^2 + \eta \quad [1.1]$$

donde  $h(x, y)$  es la altura como función de las coordenadas del plano  $(x, y)$ . Esta descripción, que no permite la formación de marquesinas (*overhangs*), recibe el nombre de *gauge de Monge* [KRU 97]. El

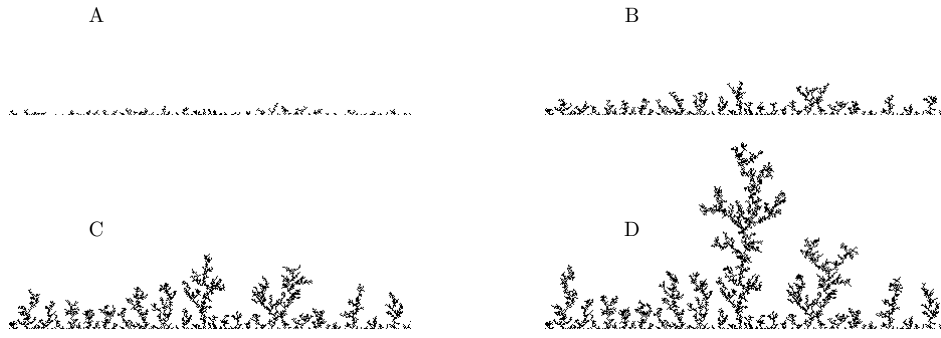


FIGURA 1.4. Configuración típica de crecimiento de una estructura simulado mediante DLA a distintos tiempos.

significado del término  $\nabla^2 h(x, y)$  es el *potencial químico* sobre la superficie. El número de enlaces libres es alto para un punto que está en el fondo de un valle, es decir, un punto con un valor elevado para  $\nabla^2 h(x, y)$ . Por tanto,  $\nu$  mide la probabilidad de que un átomo en la fase gaseosa se fije a la superficie, debido a dicho potencial químico. Por otro lado,  $\nabla^4 h(x, y)$  es el laplaciano de dicho potencial químico, de forma que  $\nu_2 \nabla^4 h(x, y)$  da cuenta de la difusión de los átomos ya adsorbidos por la superficie, debido a las diferencias de potencial químico entre distintas regiones.

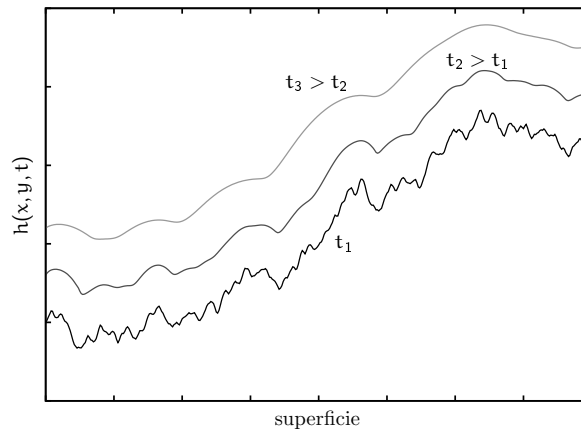


FIGURA 1.5. Simulación de un crecimiento según la ecuación KPZ para distintos tiempos, para valores típicos de los parámetros explicados en el texto.

El término no lineal,  $\lambda |\nabla h(x, y)|^2$  proviene de tener en cuenta que el número de partículas adheridas a la superficie será proporcional a la medida de ésta, dada por  $\sqrt{1 + (\partial_x h)^2 + (\partial_y h)^2} dx dy$ . Desarrollando hasta segundo orden en potencias de las derivadas de  $h$  se obtiene el término precedente. Por supuesto, se trata de un desarrollo para pendientes pequeñas. El último término,  $\eta$ , es un ruido blanco, incluido para dar cuenta de las fluctuaciones térmicas. Se trata de un campo aleatorio, de media cero y cuya correlación es una función delta, tanto en el espacio como en el tiempo. La figura 1.5 muestra una simulación de la ecuación [1.1] donde se muestra el campo  $h(x, y)$  a distintos tiempos.

## 1.6 Plan del trabajo

Con el objetivo de estudiar y caracterizar la transición de fase 2D-3D del modo de crecimiento Stranski-Krastanov en las heteroestructuras semiconductoras Ge/Si e InAs/GaAs, en el capítulo 2 de esta tesis desarrolla las bases de la teoría elástica clásica, poniendo el énfasis en los resultados que serán de utilidad en el resto de este trabajo. El capítulo 3 describe una aproximación de tipo *campo medio* para explicar la transición de fase del modo de crecimiento de Stranski-Krastanov en heteroestructuras. Esta aproximación ha permitido analizar los fenómenos de crecimiento asociados a diversos materiales semiconductores de interés tecnológico. En el capítulo 4 se ha desarrollado la teoría elástica continua minimizando el funcional energía elástica de manera exacta a través de las ecuaciones de Euler-Lagrange. En el capítulo 5 se analiza una aproximación de carácter semiatómico para el mismo problema, basada en el modelo de Frenkel-Kontorova. Dicho modelo se ha extendido para permitir pequeños movimientos de los átomos en la dirección de crecimiento para dar cuenta de la transición de fase 2D-3D. Para terminar, se resumen las conclusiones a las que se ha llegado en este trabajo y se plantean posibles líneas de trabajo futuro.

Los capítulos 3, 4 y 5 constan de dos partes. En la primera se describe el problema físico a estudiar y se desarrolla la teoría básica a aplicar. En la segunda parte se comentan los artículos publicados, así como las líneas de trabajo futuro. El texto íntegro de dichos artículos aparece al final de esta tesis, acompañados del curriculum investigador de la candidata, donde se puede observar otros proyectos de investigación en física teórica en los que ha tomado parte.

---

## 2. Bases del modelo elástico continuo

---

### 2.1 Geometría de un cuerpo deformado

Consideremos un cuerpo sólido no deformado, constituido por un continuo de *puntos materiales*, y un sistema de coordenadas cartesianas externo al mismo. Para dos puntos  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$  cualesquiera del sólido con vectores de posición  $\mathbf{x}_{\mathbf{p}} = \{x_{\mathbf{p}}^i\}_{i=1}^3$  y  $\mathbf{x}_{\mathbf{q}} = \{x_{\mathbf{q}}^i\}_{i=1}^3$  en este sistema de coordenadas, la distancia entre ellos vendrá dada por

$$s = |\mathbf{x}_{\mathbf{p}} - \mathbf{x}_{\mathbf{q}}| = \sqrt{\delta_{ij}(x_{\mathbf{p}}^i - x_{\mathbf{q}}^i)(x_{\mathbf{p}}^j - x_{\mathbf{q}}^j)}, \quad [2.1]$$

donde  $\delta_{ij}$  es la métrica del espacio euclídeo que coincide, para un sistema de coordenadas cartesiano, con la delta de Kronecker. Si el punto  $\mathbf{q}$  está infinitesimalmente próximo al punto  $\mathbf{p}$ ; es decir,  $x_{\mathbf{q}}^i = x_{\mathbf{p}}^i + dx^i$ , la distancia entre los puntos pasa a ser

$$ds = \sqrt{\delta_{ij}dx^i dx^j}. \quad [2.2]$$

Si el sólido se deforma, sus puntos materiales cambian de posición respecto al sistema de coordenadas (ver figura 2.1). En concreto, los puntos  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{q}$  pasan a tener vectores de posición  $\mathbf{X}_{\mathbf{p}}$  y  $\mathbf{X}_{\mathbf{q}}$ , respectivamente en el mismo sistema de coordenadas. Si el punto  $\mathbf{q}$  vuelve a estar infinitesimalmente próximo a  $\mathbf{p}$ , la distancia entre ellos ahora será

$$dS = \sqrt{\delta_{ij}dX^i dX^j}. \quad [2.3]$$

Consideremos la posición de un punto cualquiera del cuerpo deformado como función de las coordenadas del punto en el cuerpo sin deformar:  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x})$ . Si la deformación es infinitesimal se obtiene que:

$$dX^i = \frac{\partial X^i}{\partial x^j} dx^j. \quad [2.4]$$

La relación anterior se puede invertir, es decir:  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X})$  y, por tanto,

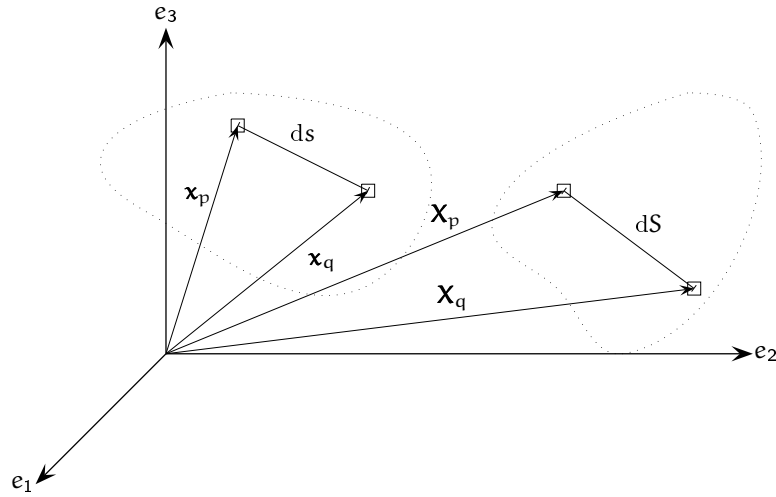


FIGURA 2.1. Distancia entre dos puntos próximos del cuerpo sin deformar (minúsculas) y deformado (mayúsculas) en el mismo sistema de referencia.

$$dx^j = \frac{\partial x^j}{\partial X^i} dX^i. \quad [2.5]$$

En definitiva, la ecuación [2.4] permite expresar el elemento de longitud del sólido deformado ( $dS$ ) en función de las coordenadas del cuerpo sin deformar, mientras que con la expresión [2.5] se puede escribir el elemento de longitud del sólido sin deformar ( $ds$ ) en función de las coordenadas del sólido deformado<sup>[1]</sup>. Sustituyendo la ecuación [2.4] en la ecuación [2.3], el elemento diferencial de longitud del cuerpo deformado es

$$dS = \sqrt{\delta_{ij} \frac{\partial X^i}{\partial x^k} \frac{\partial X^j}{\partial x^l} dx^k dx^l} = \sqrt{G_{kl} dx^k dx^l}, \quad [2.6]$$

donde  $G_{kl}$  es un tensor métrico definido por

$$G_{kl} \equiv \delta_{ij} \frac{\partial X^i}{\partial x^k} \frac{\partial X^j}{\partial x^l}. \quad [2.7]$$

Procediendo de forma similar, se puede establecer la relación entre los elementos de volumen y superficie de los cuerpos sin deformar y deformado. Para un sólido sin deformar, sean tres vectores infinitesimales no coplanarios  $d\mathbf{r}$ ,  $d\mathbf{s}$  y  $d\mathbf{t}$ , entonces el diferencial de volumen encerrado por estos vectores es

$$dv = \epsilon_{ijk} dr^i ds^j dt^k \quad [2.8]$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  es el tensor completamente antisimétrico de Levi-Civita. Asimismo, cuando el cuerpo se deforma, los vectores pasan a ser  $d\mathbf{R}$ ,  $d\mathbf{S}$  y  $d\mathbf{T}$  y el volumen encerrado será

[1] Se denominan coordenadas de Lagrange a las coordenadas del cuerpo sin deformar y coordenadas de Euler a las coordenadas del cuerpo deformado. Estos nombres provienen de mecánica de fluidos.

$$dV = \epsilon_{ijk} dR^i dS^j dT^k \quad [2.9]$$

Teniendo en cuenta la ecuación [2.4], que relaciona un vector infinitesimal sobre el cuerpo deformado con el mismo antes de la deformación, el elemento de volumen dado por la expresión [2.9] se puede escribir como

$$dV = \epsilon_{ijk} \frac{\partial X^i}{\partial x^n} \frac{\partial X^j}{\partial x^m} \frac{\partial X^k}{\partial x^l} dr^n ds^m dt^l \quad [2.10]$$

donde

$$\epsilon_{ijk} \frac{\partial X^i}{\partial x^n} \frac{\partial X^j}{\partial x^m} \frac{\partial X^k}{\partial x^l} \equiv J \epsilon_{nml} \quad [2.11]$$

siendo  $J \equiv \det(\partial X^i / \partial x^j)$  el determinante de la transformación de coordenadas del cuerpo sin deformar a coordenadas del cuerpo deformado; por tanto, la ecuación [2.10] se reescribe como

$$dV = J \epsilon_{nml} dr^n ds^m dt^l = J dv \quad [2.12]$$

o su inversa como

$$dv = J^{-1} dV. \quad [2.13]$$

Para estudiar el elemento de área  $da_i$  se consideran los dos vectores infinitesimales que la encierran,  $d\mathbf{r}$  y  $d\mathbf{s}$ . En función de éstos el diferencial de área es

$$da_i = \epsilon_{ijk} dr^j ds^k \quad [2.14]$$

y de forma similar cuando el cuerpo está deformado

$$dA_i = \epsilon_{ijk} dR^j dS^k \quad [2.15]$$

Si se escriben los vectores del cuerpo deformado en función de los del cuerpo sin deformar (expresión [2.4]) se obtiene

$$dA_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial X^j}{\partial x^m} \frac{\partial X^k}{\partial x^l} dr^m ds^l \quad [2.16]$$

y de forma similar a la expresión [2.11]

$$\epsilon_{ijk} \frac{\partial X^j}{\partial x^m} \frac{\partial X^k}{\partial x^l} \equiv J \epsilon_{nml} \frac{\partial x^n}{\partial X^i} \quad [2.17]$$

que llevado a la expresión [2.15]

$$dA_i = J \epsilon_{nml} \frac{\partial x^n}{\partial X^i} dr^m ds^l = J \frac{\partial x^n}{\partial X^i} da_n \quad [2.18]$$

o su inversa

$$da_n = J^{-1} \frac{\partial X^i}{\partial x^n} dA_i. \quad [2.19]$$

## 2.2 Tensor de deformaciones

El *tensor de deformaciones* cuantifica el cambio del elemento de longitud bajo deformaciones. Pasamos a definirlo a partir de la variación de las distancias entre puntos materiales infinitesimalmente próximos. Dichas distancias vienen dadas por las expresiones [2.2] y [2.6], que corresponden respectivamente al cuerpo sin deformar y deformado

$$(dS)^2 - (ds)^2 = (G_{ij} - \delta_{ij}) dx^i dx^j \equiv 2u_{ij} dx^i dx^j, \quad [2.20]$$

donde  $u_{ij}$  es conocido como el *tensor de deformaciones de Lagrange* [2].

A partir de la ecuación anterior se obtiene

$$u_{ij} \equiv \frac{1}{2} (G_{ij} - \delta_{ij}), \quad [2.21]$$

con  $G_{ij}$  dado por la ecuación [2.7] [3].

Podemos evaluar el tensor de deformaciones de Lagrange definiendo un *vector desplazamiento*  $\mathbf{u}$  (ver figura 2.2), dado por

$$\mathbf{u} \equiv \mathbf{X} - \mathbf{x}. \quad [2.22]$$

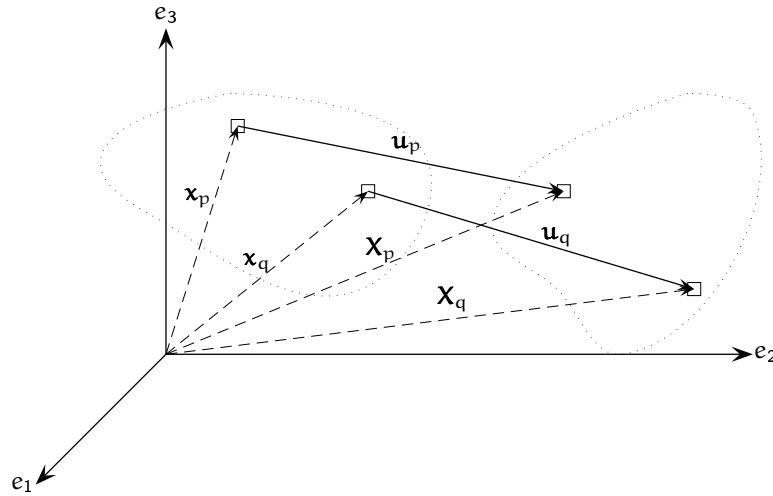


FIGURA 2.2. Cuerpo deformado y sin deformar con los vectores desplazamiento de dos puntos materiales.

[2] Se denomina también tensor de deformaciones de Green o de Green-Lagrange.

[3] Un argumento heurístico para incluir el factor  $1/2$  en la definición del tensor de deformaciones es el siguiente. La diferencia de cuadrados de la expresión [2.20] se puede escribir como  $(dS + ds)(dS - ds)$ . Si la deformación es pequeña,  $dS \simeq ds$  y por lo tanto  $(dS + ds) \simeq 2ds$ . Con el desarrollo anterior, la expresión [2.20] da una relación simple para la *deformación relativa*:  $(dS - ds)/ds = u_{ij}(dx^i/ds)(dx^j/ds)$  [MUR 67].

A partir del vector desplazamiento se puede escribir el tensor métrico  $G_{ij}$  correspondiente al cuerpo deformado como

$$G_{ij} = \delta_{kl} \frac{\partial (u^k + x^k)}{\partial x^i} \frac{\partial (u^l + x^l)}{\partial x^j} = \delta_{ij} + \delta_{hi} \frac{\partial u^h}{\partial x^j} + \delta_{hj} \frac{\partial u^h}{\partial x^i} + \delta_{kl} \frac{\partial u^k}{\partial x^i} \frac{\partial u^l}{\partial x^j}, \quad [2.23]$$

con lo que el tensor de deformaciones de Lagrange (ecuación [2.21]) queda

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \delta_{hi} \frac{\partial u^h}{\partial x^j} + \delta_{hj} \frac{\partial u^h}{\partial x^i} + \delta_{kl} \frac{\partial u^k}{\partial x^i} \frac{\partial u^l}{\partial x^j} \right). \quad [2.24]$$

Es posible obtener una expresión para el tensor de deformaciones en función de las coordenadas del cuerpo deformado. Siguiendo un razonamiento similar al anterior se llega al *tensor de deformaciones de Euler*, dado por

$$u_{ij}^{\text{Euler}} \equiv \frac{1}{2} \left( \delta_{hi} \frac{\partial u^h}{\partial X^j} + \delta_{hj} \frac{\partial u^h}{\partial X^i} - \delta_{kl} \frac{\partial u^k}{\partial X^i} \frac{\partial u^l}{\partial X^j} \right). \quad [2.25]$$

Para deformaciones pequeñas, es aceptable despreciar los términos cuadráticos en el gradiente del vector desplazamiento que aparecen en el tensor de deformaciones. Se define así el *tensor de deformaciones de Cauchy*:

$$u_{ij}^{\text{Cauchy}} \equiv \frac{1}{2} \left( \delta_{hi} \frac{\partial u^h}{\partial x^j} + \delta_{hj} \frac{\partial u^h}{\partial x^i} \right) = -\frac{1}{2} \left( \delta_{hi} \frac{\partial u^h}{\partial X^j} + \delta_{hj} \frac{\partial u^h}{\partial X^i} \right). \quad [2.26]$$

Se observa que las aproximaciones lineales a los tensores de deformación de Euler y Lagrange están trivialmente relacionadas. El tensor de deformaciones de Cauchy también se puede obtener como la parte simétrica del gradiente del vector desplazamiento, siendo la parte antisimétrica la correspondiente a las rotaciones rígidas [Nye 90].

## 2.3 Densidad de energía elástica

En teoría de elasticidad clásica se considera como punto de partida para las deformaciones de un sólido su *estado natural*<sup>[4]</sup>. Cuando se deforma el cuerpo ligeramente respecto a dicho estado natural y posteriormente se libera de las fuerzas externas que lo perturbaron, éste recupera su configuración inicial independientemente de cómo fueron aplicadas dichas fuerzas. Por tanto, el trabajo aplicado sobre el cuerpo para deformarlo es almacenado por el mismo y liberado al volver a su estado natural [Tru 52]. Así pues, en la teoría de elasticidad se estudian deformaciones a partir de las cuales es posible regresar al estado original del sólido.

Existen dos planteamientos posibles para analizar la dinámica de un cuerpo elástico deformado. Según Cauchy un sólido perfectamente elástico es aquél en el que la tensión es función de la deformación. En este trabajo seguiremos la formulación de Green, según la cual, un cuerpo es elástico cuando el trabajo acumulado tras una deformación es sólo función de ésta. En otras

---

[4] Se considera un cuerpo en su estado natural cuando no actúan fuerzas externas sobre él y se encuentra a temperatura constante.



palabras, la formulación de Cauchy trabaja con *fuerzas* y la de Green con *energías* [TRU 52]. En este trabajo hemos optado por la formulación de Green debido a ventajas que quedarán expuestas a lo largo de este capítulo.

Para un cuerpo a temperatura constante, el trabajo elástico almacenado coincide con la energía libre de Helmholtz, a la que nos referiremos como *energía elástica*. Si se tratase de un proceso a entropía constante, la energía elástica se correspondería con la energía interna.

Siguiendo el método de Green, la densidad volumétrica de energía elástica de un cuerpo deformado se puede escribir como

$$f \equiv f(u_{ij}). \quad [2.27]$$

Dado que analizaremos, fundamentalmente, deformaciones pequeñas, la densidad de energía libre se puede aproximar por los primeros términos de su desarrollo en serie:

$$\begin{aligned} f(u_{ij}) = & f(0) + \left. \frac{\partial f}{\partial u_{ij}} \right|_{u=0} u_{ij} + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial u_{ij} \partial u_{kl}} \right|_{u=0} u_{ij} u_{kl} + \\ & \frac{1}{3!} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial u_{ij} \partial u_{kl} \partial u_{mn}} \right|_{u=0} u_{ij} u_{kl} u_{mn} + \dots \end{aligned} \quad [2.28]$$

El primer término de este desarrollo es la energía libre del cuerpo en su estado natural, que sólo depende de la temperatura y se puede considerar nula sin pérdida de generalidad. El segundo término del desarrollo ha de ser nulo dado que el estado natural es de mínima energía. Así, la densidad de energía libre queda

$$f(u_{ij}) = \frac{1}{2} C^{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{6} C^{ijklmn} u_{ij} u_{kl} u_{mn} + \dots \quad [2.29]$$

donde  $C^{ijkl}$  y  $C^{ijklmn}$  son los *tensores de constantes elásticas* [5] de segundo y tercer orden respectivamente, y se corresponden con la segunda y tercera derivadas de la densidad de energía libre respecto al tensor de deformaciones. Considerar más términos en el desarrollo en serie llevaría a definir constantes elásticas de orden superior. Para deformaciones pequeñas se puede aproximar la ecuación [2.29] por su primer término

$$f(u_{ij}) = \frac{1}{2} C^{ijkl} u_{ij} u_{kl} \quad \forall i, j, k, l = 1, 2, 3. \quad [2.30]$$

Una teoría elástica de orden superior requiere llegar hasta cuarto orden para estar bien definida matemáticamente [6]. Las formulaciones de Lagrange y Cauchy para el tensor de deformación dan lugar a una ambigüedad en la definición de las constantes elásticas de orden superior. La razón es la siguiente. El tensor de deformaciones de Lagrange es no lineal desde el punto de vista geométrico, mientras que el de Cauchy es lineal [LEI 74]. Esto origina que algunos términos que son de orden  $n$  trabajando con el tensor de Lagrange, sean de orden  $n + 1$  cuando tomamos el tensor de Cauchy.

[5] También se denominan *constantes elásticas de rigidez* o *stiffness*. Otra notación usada para  $C^{ijkl}$  es  $c_{\alpha\beta}$ , conocida como notación de Voight, donde  $\alpha$  y  $\beta$  toman los valores de 1 a 6 en correspondencia con 11, 22, 33, 23, 31 y 12. Esta notación es posible gracias a las simetrías que presenta el tensor de deformaciones.

[6] Incluyendo sólo términos hasta un orden impar la energía no estaría acotada.

Por otra parte, las constantes elásticas de orden superior son difíciles de medir experimentalmente [LB 82]. Esta dificultad de medida da a entender que su efecto es pequeño en la mayor parte de los materiales. Uno de los pocos fenómenos físicos de relevancia en los que los términos de la energía elástica de orden superior son importantes es la *dilatibilidad térmica* [AM 76].

En este trabajo no tenemos en cuenta estos fenómenos y, por tanto, hemos optado por restringir la formulación hasta segundo orden, empleando el tensor de deformaciones de Lagrange.

## 2.4 Simetrías del tensor de constantes elásticas

El tensor de constantes elásticas de segundo orden consta de cuatro índices contravariantes, es decir 81 componentes. Dado que el tensor de deformaciones es simétrico (ecuación [2.24]), el producto  $u_{ij}u_{kl}$  es invariante bajo permutaciones de índices  $ij \leftrightarrow ji$ ,  $kl \leftrightarrow lk$  e  $ij \leftrightarrow kl$ . Debido a la invariancia de este producto, las componentes del tensor de constantes elásticas deben satisfacer la siguiente igualdad

$$C^{ijkl} = C^{jikl} = C^{jilk} = C^{ijlk} = C^{klij} = C^{klji} = C^{lkji} = C^{lki j}, \quad [2.31]$$

con lo que sólo quedan 21 componentes distintas<sup>[7]</sup>. Este número puede reducirse aún más debido a las simetrías intrínsecas del material.

Los *cuerpos amorfos* son homogéneos e isótropos. La energía, por tanto, no debe depender de la dirección en la que se produce la deformación. En consecuencia, tan sólo existen dos combinaciones cuadráticas en los elementos de  $u_{ij}$  que sean invariantes bajo el grupo de simetrías [TRU 52]. Una de ellas es el cuadrado de la traza del tensor de deformaciones,  $(\delta^{ij}u_{ij})^2$ , y la otra es la suma de los cuadrados de todas las componentes,  $\delta^{ik}\delta^{jl}u_{kl}u_{ij}$ . La densidad de energía libre se escribe en términos de estos dos invariantes como:

$$f = \frac{1}{2}\lambda (\delta^{ij}u_{ij})^2 + \mu \delta^{ik}\delta^{jl}u_{kl}u_{ij}, \quad [2.32]$$

donde  $\lambda$  y  $\mu$  son los *coeficientes de Lamé* [8]. El tensor de constantes elásticas, por tanto, tan sólo tiene dos valores independientes,  $C^{iiii}$  y  $C^{ijij}$  y un tercer valor no nulo, combinación de estos dos, dado que  $C^{ijij} = (C^{iiii} + C^{ijij})/2$ . La relación entre estas constantes y las de Lamé es

$$\lambda = C^{iiii} \quad \mu = C^{ijij} \quad [2.33]$$

A la hora de estudiar los cuerpos cristalinos hay que tener en cuenta su grupo de simetría. Analizaremos las constantes elásticas correspondientes a un *crystal cúbico*, dado que los materiales estudiados en este trabajo pertenecen a dicho grupo de simetrías. Supondremos que los ejes cristalográficos coinciden con los ejes de coordenadas.

[7] Las 21 componentes distintas son:  $C^{1111}$ ,  $C^{2222}$ ,  $C^{3333}$ ,  $C^{1122}$ ,  $C^{2233}$ ,  $C^{1133}$ ,  $C^{1123}$ ,  $C^{2231}$ ,  $C^{3312}$ ,  $C^{1131}$ ,  $C^{2212}$ ,  $C^{3323}$ ,  $C^{1112}$ ,  $C^{2223}$ ,  $C^{3331}$ ,  $C^{2323}$ ,  $C^{3131}$ ,  $C^{1212}$ ,  $C^{2331}$ ,  $C^{3112}$ ,  $C^{2312}$ .

[8] La expresión de la energía también se puede escribir en función del *módulo de Young*,  $E$ , y el *coeficiente de Poisson*,  $\nu$ . En cualquier caso sólo hay dos constantes diferentes que definen el comportamiento del material.

Un cristal cúbico está caracterizado por una simetría rotacional de orden 3 en torno a cada una de las cuatro diagonales del cubo unidad. El efecto de estas rotaciones sobre los ejes de la base canónica ( $e_1, e_2, e_3$ ) es:

	Rotación de $2\pi/3$ en torno al eje	Tiene por efecto
$R_0$	$[111]$	$e_1 \rightarrow e_2 \rightarrow e_3 \rightarrow e_1$
$R_1$	$[\bar{1}11]$	$e_1 \rightarrow -e_3 \rightarrow -e_2 \rightarrow e_1$
$R_2$	$[1\bar{1}1]$	$e_1 \rightarrow e_3 \rightarrow -e_2 \rightarrow e_1$
$R_3$	$[11\bar{1}]$	$e_1 \rightarrow -e_3 \rightarrow e_2 \rightarrow e_1$

TABLA 2.1. Efecto de las rotaciones de  $2\pi/3$  en torno a las diagonales de un cubo sobre los ejes del mismo, paralelos a los ejes de coordenadas [Jos 98].

Entre estas transformaciones no están incluidas las reflexiones en torno a ningún plano. No se han considerado por no ser simetrías de un cristal cúbico con base.

Considérese un cuerpo cristalino en una orientación tal que sus ejes coinciden con los de coordenadas y un tensor de deformaciones  $u_{ij}$ . La energía elástica quedará determinada por la expresión [2.30]. Si se aplica la primera de las operaciones de la tabla 2.1 ( $R_0$ ) al tensor de deformaciones, las componentes de dicho tensor cambiarán según el siguiente patrón:

$$\begin{array}{ccccccccc}
 u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{31} & u_{32} & u_{33} \\
 \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\
 u_{22} & u_{23} & u_{21} & u_{32} & u_{33} & u_{31} & u_{12} & u_{13} & u_{11}
 \end{array} \quad [2.34]$$

El requisito de que la densidad de energía elástica sea invariante bajo esta transformación y las demás del grupo reduce la cantidad de constantes elásticas independientes de 21 a 7:

$$C^{iiii}, C^{iijj}, C^{ijij}, C^{iijk}, C^{ijjk}, C^{iiij} \quad \forall i \neq j \neq k \neq i \quad [2.35]$$

donde el último de estos seis términos se subdivide en dos:  $C^{1112} = C^{2223} = C^{3331}$  y  $C^{1113} = C^{2221} = C^{3332}$ . De estos 7 valores, demostraremos a continuación, que sólo son no nulos los tres primeros. Mediante combinaciones de operaciones descritas en la tabla 2.1, es posible obtener una transformación que cumpla:

$$u_{ii} \rightarrow u_{ii} \quad \forall i \quad u_{ik} \rightarrow -u_{ik} \quad \forall i \neq k. \quad [2.36]$$

Esta transformación cambia el signo de los términos de la energía elástica en los que cada índice no aparezca un número par de veces. La invariancia de la energía bajo esta transformación exige la anulación de las constantes elásticas asociadas:

$$C^{iijk} = C^{jik} = C^{ijki} = C^{jiik} = C^{jiki} = C^{jkii} = 0 \quad \forall j \neq k. \quad [2.37]$$

Como conclusión, para un cristal cúbico, donde los ejes del cristal coincidan con los del sistema de referencia, cualquier término no nulo del tensor de constantes elásticas tendrá sólo un número par de índices idénticos. Los tres términos no nulos distintos son [9]:

[9] En notación de Voight quedan:  $C^{iiii} = c_{11}$ ,  $C^{iijj} = c_{12}$  y  $C^{ijij} = c_{44}$ .

$$\begin{aligned}
C^{iiii} &\Rightarrow C^{1111} = C^{2222} = C^{3333} \\
C^{ijij} &\Rightarrow C^{1122} = C^{2233} = C^{3311} = C^{2211} = C^{3322} = C^{1133} \\
C^{ijij} &\Rightarrow C^{1212} = C^{1221} = C^{2121} = C^{2112} = C^{2323} = C^{2332} = \\
&\quad C^{3232} = C^{3223} = C^{3131} = C^{3113} = C^{1313} = C^{1331}
\end{aligned} \tag{2.38}$$

y en consecuencia, dan como resultado la siguiente expresión para la densidad de energía elástica:

$$\begin{aligned}
f &= \frac{1}{2} C^{1111} (u_{11}^2 + u_{22}^2 + u_{33}^2) + \\
&\quad + C^{1122} (u_{11}u_{22} + u_{22}u_{33} + u_{33}u_{11}) + 2C^{1212} (u_{12}^2 + u_{23}^2 + u_{31}^2).
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Otros sistemas cristalográficos presentan distintas componentes del tensor de constantes elásticas independientes [AM 76] dando lugar a más términos en la expresión de la energía.

## 2.5 Efecto de la orientación del cristal en la energía elástica

Cuando consideramos un cristal cuyos ejes cristalográficos no coinciden con los del sistema de referencia (debido a un giro relativo entre ambos), hemos de cambiar la expresión de la energía elástica respecto a la dada por la ecuación [2.39]. Si el cristal es cúbico aparecen nuevos términos, cuyos coeficientes deben ser función de las tres constantes elásticas independientes expuestas en la ecuación [2.38].

Denotemos mediante  $e_i$  los ejes del sistema de referencia externos al cuerpo. La orientación del cristal se determina normalmente desarrollando el vector  $e_3$  en los ejes cristalográficos, en notación de *índices de Miller* [AM 76]. Así, se dice que un cuerpo está en orientación  $(n_1 n_2 n_3)$  si el vector  $e_3$  del sistema de referencia externo es paralelo al vector  $(n_1, n_2, n_3)$  del sistema de referencia de los ejes cristalográficos. Esta notación adolece de una ambigüedad: no especifica la posición de los vectores  $e_1$  y  $e_2$  respecto a los ejes del cuerpo.

Inicialmente, sólo conocemos las constantes elásticas en la orientación  $(001)$  cuando  $e_1 = (100)$  y  $e_2 = (010)$ . Supongamos que el cuerpo rota hasta alcanzar la orientación  $(n_1 n_2 n_3)$  mediante el ángulo más pequeño (ver figura 2.3). Dicha rotación viene expresada mediante la matriz

$$R^i_j(n_1 n_2 n_3) = \begin{pmatrix} \frac{n_3 n_1^2 + |\mathbf{n}| n_2^2}{|\mathbf{n}|(n_1^2 + n_2^2)} & \frac{n_1 n_2 (n_3 - |\mathbf{n}|)}{|\mathbf{n}|(n_1^2 + n_2^2)} & -\frac{n_1}{|\mathbf{n}|} \\ \frac{n_1 n_2 (n_3 - |\mathbf{n}|)}{|\mathbf{n}|(n_1^2 + n_2^2)} & \frac{n_3 n_2^2 + |\mathbf{n}| n_1^2}{|\mathbf{n}|(n_1^2 + n_2^2)} & -\frac{n_2}{|\mathbf{n}|} \\ \frac{n_1}{|\mathbf{n}|} & \frac{n_2}{|\mathbf{n}|} & \frac{n_3}{|\mathbf{n}|} \end{pmatrix} \tag{2.40}$$

donde  $|\mathbf{n}| = \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$ . Esta matriz representa un giro en torno a la dirección  $[n_2 \bar{n}_1 0]$  de ángulo  $\beta = \arccos(n_3/|\mathbf{n}|)$ . En la figura 2.3 se muestra el caso particular en el que el eje  $(111)$  del cristal se hace coincidir con el  $e_3$  del sistema de referencia, realizando el giro en torno al eje  $[1\bar{1}0]$ .

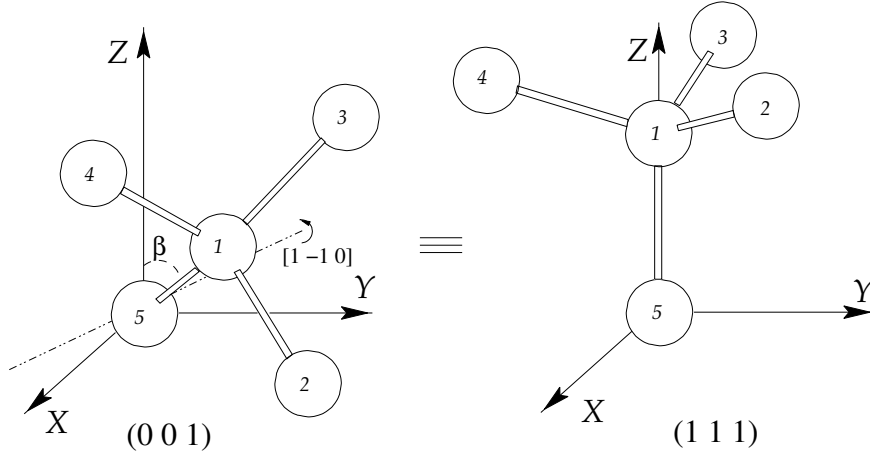


FIGURA 2.3. Giro del cristal en torno al eje  $[1\bar{1}0]$  haciendo que el eje  $(111)$  coincida con el  $e_3$ .

Tras haber aplicado la rotación expresada con la matriz [2.40], la correspondencia entre ejes del cristal y ejes externos es:

$$\begin{aligned}
 e_1 &\rightarrow \left( \frac{n_2^2}{|\mathbf{n}|} + \frac{n_3 (|\mathbf{n}|n_1^2 + n_3n_2^2)}{(n_1^2 + n_2^2)|\mathbf{n}|}, \frac{n_1n_2 (|\mathbf{n}| - n_3)}{(n_1^2 + n_2^2)|\mathbf{n}|} - \frac{n_1n_2}{|\mathbf{n}|}, -n_1 \right) \\
 e_2 &\rightarrow \left( \frac{n_1n_2 (|\mathbf{n}| - n_3)}{(n_1^2 + n_2^2)|\mathbf{n}|} - \frac{n_1n_2}{|\mathbf{n}|}, \frac{n_1^2}{|\mathbf{n}|} + \frac{n_3 (|\mathbf{n}|n_2^2 + n_3n_1^2)}{(n_1^2 + n_2^2)|\mathbf{n}|}, -n_2 \right) \\
 e_3 &\rightarrow (n_1, n_2, n_3)
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

El tensor de constantes elásticas es contravariante en sus cuatro índices. Es decir: cada uno de ellos se transforma como un vector del cristal. Las nuevas constantes elásticas se obtienen a partir de las antiguas mediante la transformación tensorial habitual:

$$\tilde{C}^{ijkl}(n_1n_2n_3) = R^i_m R^j_n R^k_p R^l_q C^{mnpq} \tag{2.42}$$

donde  $C^{mnpq}$  es el tensor de constantes elásticas en el sistema de referencia original.

Esta manera de especificar la orientación, nos deja libertad para realizar cualquier giro en torno al eje  $e_3$ :

$$\bar{R}^k_l(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.43}$$

Aplicando esta nueva transformación al tensor de constantes elásticas obtenemos:

$$K^{hgft}(n_1n_2n_3; \alpha) = \bar{R}^h_i(\alpha) \bar{R}^g_j(\alpha) \bar{R}^f_k(\alpha) \bar{R}^t_l(\alpha) \tilde{C}^{ijkl}(n_1n_2n_3) \tag{2.44}$$

Y la densidad de energía elástica queda como

$$f(n_1n_2n_3; \alpha) = K^{ijkl}(n_1n_2n_3; \alpha) u_{ij}u_{kl} \tag{2.45}$$

Supongamos a continuación que, en el plano perpendicular a  $e_3$  el comportamiento del cristal es *isótropo*. En ese caso sería útil *promediar* la expresión anterior para todos los posibles valores de  $\alpha$ , obteniendo:

$$f(n_1 n_2 n_3) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \, K^{ijkl}(n_1 n_2 n_3; \alpha) u_{ij} u_{kl}. \quad [2.46]$$

## 2.6 Tensor de tensiones

Se define el *tensor de tensiones* como la magnitud conjugada al tensor de deformaciones:

$$\sigma^{ij} \equiv \frac{\partial f}{\partial u_{ij}}. \quad [2.47]$$

Si el tensor de deformaciones es el de Lagrange,  $\sigma^{ij}$  se conoce como el *segundo tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff* [FUN 65].

La interpretación física del tensor de tensiones es la siguiente. La componente  $\sigma^{ij}$  se corresponde con la presión ejercida sobre un elemento de superficie perpendicular a la dirección  $e_j$  por una fuerza en la dirección  $e_i$  (ver figura 2.4).

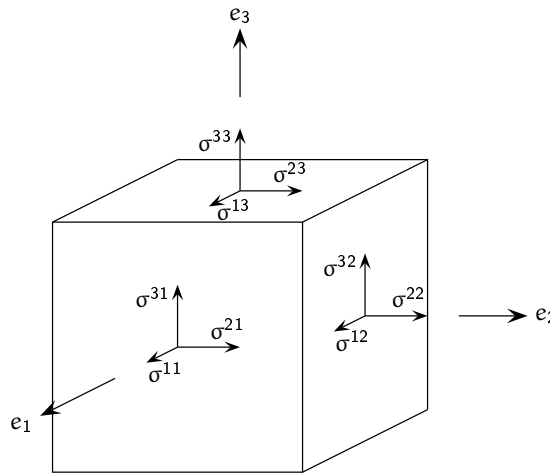


FIGURA 2.4. Componentes del tensor de tensiones en un sólido.

Dado que, en la aproximación en que trabajamos, la energía es cuadrática en el tensor de deformaciones, obtenemos

$$\sigma^{ij} = C^{ijkl} u_{kl}. \quad [2.48]$$

Por tanto, con las igualdades anteriores, la densidad de energía elástica se puede escribir como

$$f = \frac{1}{2} \sigma^{ij} u_{ij} \quad [2.49]$$

Resulta interesante obtener la expresión del tensor de tensiones referida a las coordenadas del cuerpo deformado. En este caso el tensor de deformaciones empleado debe ser el de Euler, ecuación

[2.25], y el tensor de tensiones a que da lugar se conoce como *tensor de tensiones de Euler*. Así pues, el diferencial de fuerza que sufre el cuerpo sin deformar en la  $i$ -ésima dirección es:

$$dp^i = \sigma^{ij} da_j \quad [2.50]$$

donde  $da_j$  es el diferencial de área perpendicular a la dirección  $e_j$ . Para conocer la fuerza referida a las coordenadas del cuerpo deformado hay que realizar el cambio de coordenadas apropiado para un vector contravariante [2.4]:

$$dP^i = \frac{\partial X^i}{\partial x^k} dp^k. \quad [2.51]$$

donde  $dP^i$  es el diferencial de fuerza en las coordenadas del cuerpo deformado. También se puede escribir  $dP^i$  como

$$dP^i = \Sigma^{ij} dA_j \quad [2.52]$$

donde  $dA_j$  y  $\Sigma^{ij}$  son, respectivamente, el diferencial de área y el tensor de tensiones correspondientes a las coordenadas del cuerpo deformado. Este tensor  $\Sigma^{ij}$  es el tensor de tensiones de Euler.

Igualando las expresiones [2.51] y [2.52], y considerando la relación entre los elementos de área del cuerpo deformado y sin deformar (ecuación [2.18]) se obtiene la relación entre el segundo tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff y el de Euler

$$\Sigma^{ij} = J^{-1} \frac{\partial X^i}{\partial x^k} \sigma^{kl} \frac{\partial X^j}{\partial x^l}. \quad [2.53]$$

Finalmente, un concepto del que haremos uso en la aplicación de la teoría elástica continua a heteroestructuras es el concepto de *tensión acumulada*. Definimos esta magnitud como la integral de la componente del tensor de tensiones  $\sigma^{ij}$  (ecuación [2.48]) a lo largo del eje  $k$ . En particular nos fijaremos en la tensión acumulada según la dirección de crecimiento de las componentes diagonales del tensor de tensiones, por ejemplo  $\sigma^{xx}$

$$\langle \sigma^{xx} \rangle \equiv \int \sigma^{xx} dz. \quad [2.54]$$

## 2.7 Energía superficial

La energía necesaria para crear una unidad de área en la superficie del sólido a temperatura constante se denomina *tensión superficial*,  $\gamma$ , y depende, en principio, de los índices de Miller de la cara que queda expuesta. La energía superficial se obtiene integrando este valor a toda la superficie del sólido:

$$F_{\text{sup}} = \int_{\partial\Omega} \gamma dA. \quad [2.55]$$

Desde un punto de vista microscópico, esta energía tiene su origen en los enlaces atómicos que quedan incompletos en la superficie del material. Los átomos de la superficie tienen menos vecinos que los del interior. Los electrones que servirían para establecer enlaces con los átomos de la capa superior revierten en la formación de nuevos enlaces sobre la superficie. Esto da lugar a la llamada *reconstrucción* de la superficie, fenómeno mediante el cual puede cambiar la periodicidad de la red en ésta respecto a lo que dicta el volumen.

A temperaturas suficientemente altas se puede considerar que  $\gamma$  es independiente de la orientación. Así, la forma de equilibrio de un sólido, mediante la cual la energía sería mínima, es una esfera. Si la temperatura es inferior, el valor de  $\gamma$  depende de manera compleja de la cara expuesta, dando así origen a la gran variedad de estructuras superficiales de los cristales reales.

Para distintas orientaciones, se puede suponer en primera aproximación que la tensión superficial es proporcional a la densidad de átomos de la cara externa  $N$ . A partir de una orientación podremos obtener una estimación del valor de  $\gamma$  en cualquier otra orientación [NAK 99] según

$$\gamma_{(n_1 n_2 n_3)} = \frac{N_{(n_1 n_2 n_3)}}{N_{(m_1 m_2 m_3)}} \gamma_{(m_1 m_2 m_3)}. \quad [2.56]$$

En los casos a tratar en esta memoria, partiremos de la orientación (001) y estudiaremos orientaciones (11 $n_3$ ). Para un cristal cúbico el cociente entre densidades tiene la forma:

$$\frac{N_{(11n_3)}}{N_{(001)}} = \frac{2}{\sqrt{1 + 1 + n_3^2}}. \quad [2.57]$$

## 2.8 Energía total de un sólido deformado

Finalmente, para conocer la energía total de un sólido deformado, hay que sumar las contribuciones de la energía superficial y de la energía elástica; es decir

$$F = F_{\text{sup}} + F_{\text{elas}}. \quad [2.58]$$

La primera de ellas ha quedado descrita en la ec. [2.55] y para determinar la segunda contribución hay que integrar la densidad de energía elástica (ec. [2.30]) a través de todo el volumen del sólido; por tanto

$$F_{\text{elas}} = \int_{\omega} \frac{1}{2} C^{ijkl} u_{ij} u_{kl} dv. \quad [2.59]$$



La energía total de un sólido deformado es entonces:

$$F = \int_{\partial\Omega} \gamma dA + \int_{\omega} \frac{1}{2} C^{ijkl} u_{ij} u_{kl} dv. \quad [2.60]$$

## 2.9 Expresión del vector desplazamiento

Como quedó expuesto al inicio de este capítulo, las coordenadas de un punto en el cuerpo deformado dependen de las que tuviese en el cuerpo sin deformar,  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x})$ . En esta sección procuraremos dar una forma más concreta para el vector desplazamiento que nos permita aplicar la teoría elástica.

Sin pérdida de generalidad, siempre se pueden escribir las coordenadas de los puntos materiales que forman el cristal deformado en función de las coordenadas del mismo sin deformar como:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_x} \int_0^x a_x(\tilde{x}, y, z) d\tilde{x} \\ \frac{1}{a_y} \int_0^y a_y(x, \tilde{y}, z) d\tilde{y} \\ \frac{1}{a_z} \int_0^z a_z(x, y, \tilde{z}) d\tilde{z} \end{pmatrix} \quad [2.61]$$

donde  $a_i(\mathbf{x})$  son unas funciones que, por analogía con el modelo atomístico, denominaremos *parámetros de red*, y  $a_i$  es el valor de las mismas en equilibrio. Nótese que sólo es relevante el *cociente* entre estas dos magnitudes, ambas con dimensión de longitud, que podríamos denominar *factor de dilatación local* <sup>[10]</sup>.

Obsérvese que las integrales se efectúan sobre coordenadas del cuerpo sin deformar. Por tanto, estamos realizando la hipótesis implícita de que el punto  $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$  no se desplace.

Introduciendo el vector [2.61] en la ecuación [2.22] obtendremos el vector desplazamiento, a partir del cual es posible calcular el tensor de deformaciones  $u_{ij}$  [2.24]. Para ello calcularemos por separado las derivadas de las componentes del vector desplazamiento:

$$\partial_i u^i = \frac{a_i(\mathbf{x}) - a_i}{a_i} \quad [2.62]$$

$$\partial_j u^i = \frac{1}{a_i} \int_0^{x^i} \frac{\partial a_i}{\partial x^j} d\tilde{x}_i \quad [2.63]$$

donde *no* se aplica el convenio de suma de índices. Nótese la expresión para  $\partial_i u^i$ , que denominaremos *desajuste efectivo*:

$$\delta_i(\mathbf{x}) \equiv \frac{a_i(\mathbf{x}) - a_i}{a_i} \quad [2.64]$$

<sup>[10]</sup> En términos matemáticos sería más apropiado expresar las coordenadas del cuerpo deformado en función de este factor de dilatación local. Sin embargo, en términos físicos, resulta conveniente para los cálculos posteriores discutir en términos de parámetros de red.

El problema físico a estudiar, crecimiento de heteroestructuras, es esencialmente anisótropo, al ser físicamente diferentes la *dirección de crecimiento* o *vertical* ( $z$ ) y las direcciones *transversales* a ella u *horizontales* ( $x$  e  $y$ ). Esto nos lleva a poder hacer una aproximación más a la expresión del vector desplazamiento y, por tanto, al tensor de deformaciones.

Consideraremos la película deformada al crecer sobre un sustrato de distinto parámetro de red dividida de manera natural en *capas en el plano* ( $x, y$ ), indexadas mediante la coordenada  $z$  del cuerpo sin deformar. Esta misma aproximación se podrá tomar para la parte del sustrato que se deforma. Realizaremos las siguientes hipótesis sobre dichas capas:

- En cada una de ellas, el parámetro de red horizontal es uniforme e isótropo,  $a(z)$ .
- El desplazamiento según la coordenada  $z$  de cada punto material es el mismo para puntos sobre la misma línea vertical, y vendrá dado por una cierta función  $u_3(x, y, z)$ , cuyas derivadas respecto a  $x$  e  $y$  supondremos de magnitud pequeña.

El vector desplazamiento puede ahora reescribirse como:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{a(z)}{a}x - x \\ \frac{a(z)}{a}y - y \\ u_3(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta(z)x \\ \delta(z)y \\ u_3(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad [2.65]$$

La deformación vendrá finalmente dada por nuestra hipótesis de coherencia en la que el sustrato y la película tienen el mismo parámetro de red en la intercara, que situaremos en  $z = 0$ , siendo sus valores de equilibrio distintos.



---

## 3. Aproximación de campo medio

---

### 3.1 Introducción

A lo largo de este capítulo desarrollaremos una aproximación de tipo *campo medio* [BDFN 93] para el estudio de la transición de fase 2D-3D en el modo de crecimiento Stranski-Krastanov de heteroestructuras. Consideraremos una *pendiente promedio* como parámetro de orden, que tomará un valor nulo en la fase de crecimiento plano, y un valor no nulo a partir del momento en el que se desarrollan estructuras tridimensionales. Siendo meramente una teoría de campo medio, no podemos predecir la *forma* que tomará la película una vez deformada.

Consideremos la expresión para el vector desplazamiento dada en la fórmula [2.65]. Hagamos que la deformación según el eje de crecimiento,  $u_3(x, y, z)$  no dependa de  $z$ , y llamémosla  $h(x, y)$ . Esta función representa la diferencia de alturas entre el punto material en el cuerpo deformado y en el cuerpo sin deformar, por tanto, tenemos

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \delta(z)x \\ \delta(z)y \\ h(x, y) \end{pmatrix} \quad [3.1]$$

Para obtener la densidad de energía elástica precisamos del tensor de deformaciones. Al suponer que la función  $h(x, y)$  es de variación lenta, los elementos de dicho tensor que implican la coordenada  $z$  serán muy pequeños y no serán tenidos en cuenta en esta aproximación. Así, los elementos relevantes quedan:

$$u_{ii} = \frac{1}{2} \left( 2\delta(z) + \delta(z)^2 + (\partial_i h(x, y))^2 \right) \quad [3.2]$$

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \partial_i h(x, y) \partial_j h(x, y) \quad [3.3]$$

con  $i, j = x, y$ .

Sin pérdida de generalidad, desarrollaremos la aproximación para la orientación (001). Tomaremos, por tanto, la forma de la energía dada por la expresión [2.39].

### 3.2 Energía elástica de la película y el sustrato deformados

Para la orientación (001) en un cristal cúbico, la energía elástica de cada capa en el plano  $(x, y)$  queda expresada como:

$$f_p = \int_{A_p} \left[ (c_{11}^p + c_{12}^p) \left( \delta_p(z)^2 + \delta_p(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_p(z)^4 \right) + \frac{1}{2} (c_{11}^p + c_{12}^p) \left( \delta_p(z) + \frac{1}{2} \delta_p(z)^2 \right) (\partial_x h^2 + \partial_y h^2) + \frac{1}{32} (3c_{11}^p + c_{12}^p + 2c_{44}^p) (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \right] dx dy \quad [3.4]$$

donde  $c_{11}^p$ ,  $c_{12}^p$  y  $c_{44}^p$  son las constantes elásticas independientes (ver capítulo 2) de la película,  $\delta_p(z)$  es el desajuste efectivo del parámetro de red de la película, dependiente de la distancia en el eje vertical, sobre el que hablaremos en la siguiente sección y  $\partial_i h = \partial_i h(x, y)$ .

Nótese que esta expresión está escrita en función de las dimensiones del cuerpo sin deformar (ver capítulo 2). Es posible reescribir la expresión anterior a través de ciertos *promedios* sobre la función  $h(x, y)$ .

$$f_p = \left[ (c_{11}^p + c_{12}^p) \left( \delta_p(z)^2 + \delta_p(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_p(z)^4 \right) + \frac{1}{2} (c_{11}^p + c_{12}^p) \left( \delta_p(z) + \frac{1}{2} \delta_p(z)^2 \right) \langle \partial_x h^2 + \partial_y h^2 \rangle + \frac{1}{32} (3c_{11}^p + c_{12}^p + 2c_{44}^p) \langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle \right] A_p \quad [3.5]$$

donde  $A_p = \int dx dy$ . El promedio  $\langle \partial_x h^2 + \partial_y h^2 \rangle$  está definido como:

$$\langle \partial_x h^2 + \partial_y h^2 \rangle = \frac{1}{A_p} \int (\partial_x h^2 + \partial_y h^2) dx dy \equiv \phi^2 \quad [3.6]$$

y nos sirve para introducir la variable  $\phi^2$ , que jugará un papel importante en lo que sigue y llamaremos *pendiente cuadrática media* [1]. El otro promedio es:

$$\langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle = \frac{1}{A_p} \int (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 dx dy \quad [3.7]$$

cuyo significado pasamos a analizar a continuación.

Si entendemos cada valor de  $\partial_x h^2 + \partial_y h^2$  como una *variable aleatoria*,  $\phi^2$  es su valor esperado. El segundo promedio (ec. [3.7]) está relacionado con la *varianza* de esta variable según la ecuación:

$$\sigma_{\phi^2}^2 = \langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle - \langle \partial_x h^2 + \partial_y h^2 \rangle^2 = \langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle - \phi^4 \quad [3.8]$$

De aquí obtenemos la relación:

---

[1] Por simplicidad a  $\phi$  se la denominará *pendiente promedio* de la película o simplemente *pendiente*.

$$\langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle = \phi^4 + \sigma_{\phi^2}^2 \quad [3.9]$$

La varianza de la pendiente depende de la forma que la superficie adopte. Si esta forma es un cono o una pirámide, el módulo de la pendiente es homogéneo (salvo en los puntos o líneas singulares) y, por tanto, dicha varianza será nula. En este caso, podemos afirmar que

$$\langle (\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2 \rangle = \phi^4. \quad [3.10]$$

Con esta aproximación a la ecuación [3.9], procedamos a escribir la expresión de la energía elástica de la película, integrando la expresión [3.4] a lo largo del eje  $z$ , desde  $z = 0$  hasta  $z = z_p$ , donde  $z_p$  es la cantidad total de película depositada:

$$\begin{aligned} E_{ep} = & A_p (c_{11}^p + c_{12}^p) \int_0^{z_p} \left( \delta_p(z)^2 + \delta_p(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_p(z)^4 \right) dz + \\ & + A_p \phi^2 \frac{1}{2} (c_{11}^p + c_{12}^p) \int_0^{z_p} \left( \delta_p(z) + \frac{1}{2} \delta_p(z)^2 \right) dz + \\ & + A_p \phi^4 \frac{1}{32} (3c_{11}^p + c_{12}^p + 2c_{44}^p) z_p. \end{aligned} \quad [3.11]$$

Para relajar las tensiones elásticas vamos a permitir que el sustrato se deforme, esta aproximación es conocida como de *sustrato no rígido*, a diferencia de considerar que el sustrato no se deforma que será conocido como *sustrato rígido*. En la mayoría de nuestros trabajos hemos utilizado la primera aproximación por ser más realista a la hora de explicar los fenómenos de crecimiento.

La deformación del sustrato tiene una expresión más simple que la de la película, debido a que no se curva, por tanto en el vector desplazamiento [3.1] la tercera componente será constante  $u_3(x, y) = k$ . Así, podemos escribir:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \delta_s(z)x \\ \delta_s(z)y \\ k \end{pmatrix} \quad [3.12]$$

con  $\delta_s(z)$  es el desajuste efectivo en el sustrato. Dado que se considera que el origen de alturas está en la intercara, al sustrato le corresponden valores negativos de la coordenada  $z$ .

De forma análoga al cálculo realizado con la película, la energía elástica de cada una de las capas infinitesimales del sustrato vendrá dada por:

$$f_s = \int_{A_s} \left[ (c_{11}^s + c_{12}^s) \left( \delta_s(z)^2 + \delta_s(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_s(z)^4 \right) \right] dx dy \quad [3.13]$$

donde  $c_{11}^s$  y  $c_{12}^s$  son las constantes elásticas del sustrato. La región de integración es el área sin deformar,  $\int dx dy \equiv A_s$ .

A la hora de integrar esta expresión para todas las alturas, elegimos un parámetro  $z_s$ , que denote la profundidad máxima a la que está deformado el sustrato y que explicaremos con más detalle en la sección 3.5. De esta manera, la energía libre total del sustrato queda:

$$E_{es} = A_s (c_{11}^s + c_{12}^s) \int_{-z_s}^0 \left( \delta_s(z)^2 + \delta_s(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_s(z)^4 \right) dz. \quad [3.14]$$

Analicemos a continuación cómo se relacionan las áreas sin deformar del sustrato y de la película en la intercara. Consideremos, p.ej., una red cuadrada. La hipótesis de crecimiento coherente nos lleva a imponer que el número de átomos sea el mismo en la primera capa de la película y la última del sustrato. Por tanto:

$$\begin{aligned} A_s &= a_s^2 N_x N_y \\ A_p &= a_p^2 N_x N_y \end{aligned} \quad [3.15]$$

donde  $N_x$  y  $N_y$  denotan el número de átomos en cada una de las direcciones principales. De esta forma,

$$A_s = \left( \frac{a_s}{a_p} \right)^2 A_p \quad [3.16]$$

e incluyendo esta relación en la energía elástica del sustrato deformado nos queda

$$E_{es} = \left( \frac{a_s}{a_p} \right)^2 A_p (c_{11}^s + c_{12}^s) \int_{-z_s}^0 \left( \delta_s(z)^2 + \delta_s(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_s(z)^4 \right) dz. \quad [3.17]$$

### 3.3 Desajuste efectivo de la película y el sustrato

La condición de coherencia implica que el parámetro de red en la intercara sea el mismo desde el sustrato o desde la película, a efectos de nuestro modelo significa que la función  $a(z)$  sea continua en  $z = 0$ .

Las condiciones que se exigen a la función que representa el parámetro de red de la región de la heteroestructura deformada son:

- a. En  $z = -z_s$  el parámetro de red recupera el valor del parámetro de red del sustrato en equilibrio y la derivada es suave en ese punto

$$a(-z_s) = a_s \quad [3.18]$$

$$\lim_{z \rightarrow -z_s} a'(z) \rightarrow 0. \quad [3.19]$$

- b. En  $z = z_p$  el parámetro de red recupera el valor del parámetro de red de la película en equilibrio y la derivada es suave, también, en ese punto

$$a(z_p) = a_p \quad [3.20]$$

$$\lim_{z \rightarrow z_p} a'(z) \rightarrow 0. \quad [3.21]$$

- c. La función  $a(z)$  es continua y derivable en la intercara.

Funciones que cumplen estos requisitos son las de tipo *sigmoide*. En particular, para nuestro trabajo, hemos optado por:

$$a(z) = A + \frac{B}{1 + C \exp\left(-\frac{z}{z_p + z_s} \ln D\right)} \quad [3.22]$$

donde las constantes A, B, C y D cumplen las condiciones anteriormente expuestas. La figura 3.1 muestra la forma del parámetro de red  $a(z)$ .

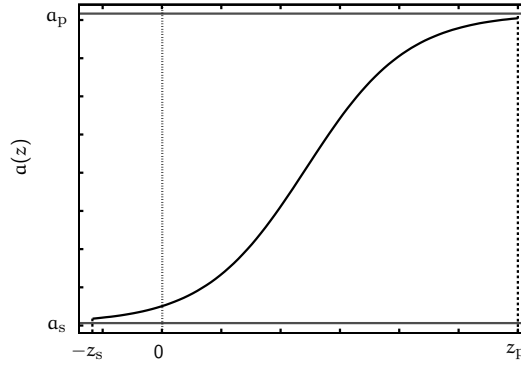


FIGURA 3.1. Parámetro de red en función de la coordenada  $z$ .

A partir del parámetro de red, definimos el desajuste efectivo (según la expresión [2.64]) para la película (subíndice p) y el sustrato (subíndice s) como:

$$\delta_j(z) = \frac{a(z)}{a_j} - 1 \quad [3.23]$$

con  $a_j$  el parámetro de red en equilibrio. Nótese que el desajuste es nulo en  $-z_s$  y  $z_p$  dado que son los puntos donde ni la película ni el sustrato están deformados y máximo para la intercara.

### 3.4 Energía superficial de la heteroestructura

Para completar el cálculo de la energía de la heteroestructura, hemos de tomar en consideración la energía superficial. Como se discutió en la sección 2.7, la energía de la superficie de la película es proporcional al área externa, y la constante de proporcionalidad depende de la orientación; i.e.,

$$E_{sp} = \gamma_p \int dA. \quad [3.24]$$

Nótese que se trata del *área deformada*. Tomaremos como expresión para el diferencial de área:

$$dA = \left(\frac{a(z_p)}{a_p}\right)^2 \sqrt{1 + \partial_x h^2 + \partial_y h^2} dx dy. \quad [3.25]$$

Si consideramos que las derivadas de  $h(x, y)$  son pequeñas, podemos desarrollar la raíz cuadrada en serie de potencias:

$$\sqrt{1 + \partial_x h^2 + \partial_y h^2} = 1 + \frac{1}{2} (\partial_x h^2 + \partial_y h^2) + \mathcal{O}\left((\partial_x h^2 + \partial_y h^2)^2\right) \quad [3.26]$$



que, sustituyendo en la expresión para la energía de la superficie [3.24], queda:

$$E_{sp} = \gamma_p \left( \frac{a(z_p)}{a_p} \right)^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \langle \partial_x h^2 + \partial_y h^2 \rangle \right) A_p \quad [3.27]$$

Y haciendo uso de la definición de pendiente cuadrática media [3.6] y la aproximación del cuadrado de la misma [3.10] se tiene

$$E_{sp} = \gamma_p A_p \left( \frac{a(z_p)}{a_p} \right)^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \phi^2 \right). \quad [3.28]$$

### 3.5 Energía total de la heteroestructura en aproximación de campo medio

La expresión final que obtenemos para la energía de la heteroestructura deformada será la suma de las tres contribuciones en las que la hemos dividido considerando el sustrato no rígido: energía elástica de la película, energía elástica del sustrato y energía superficial.

$$\begin{aligned} F = A_p & \left[ \gamma_p \left( \frac{a(z_p)}{a_p} \right)^2 + \right. \\ & + \left( \frac{a_s}{a_p} \right)^2 (c_{11}^s + c_{12}^s) \int_{-z_s}^0 \left( \delta_s(z)^2 + \delta_s(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_s(z)^4 \right) dz + \\ & + (c_{11}^p + c_{12}^p) \int_0^{z_p} \left( \delta_p(z)^2 + \delta_p(z)^3 + \frac{1}{4} \delta_p(z)^4 \right) dz + \\ & + \left( \frac{1}{2} \gamma_p \left( \frac{a(z_p)}{a_p} \right)^2 + \frac{1}{2} (c_{11}^p + c_{12}^p) \int_0^{z_p} \left( \delta_p(z) + \frac{1}{2} \delta_p(z)^2 \right) dz \right) \phi^2 + \\ & \left. + \frac{1}{32} (3c_{11}^p + c_{12}^p + 2c_{44}^p) z_p \phi^4 \right]. \end{aligned} \quad [3.29]$$

Dado que la energía libre es proporcional a  $A_p$ , conviene definir una *densidad superficial de energía* como:

$$f = \frac{F}{A_p}. \quad [3.30]$$

Esta densidad de energía libre depende de la pendiente promedio ( $\phi$ ), de la cantidad de material depositado ( $z_p$ ) y de la cantidad de sustrato que se deforma ( $z_s$ ). Supondremos una relación lineal entre estas últimas variables, es decir:

$$z_s = \alpha z_p. \quad [3.31]$$

con  $\alpha \in [0, 1]$ , y podemos reescribir la expresión de la densidad superficial de energía como

$$f = q(z_p) + r(z_p)\phi^2 + s(z_p)\phi^4 \quad [3.32]$$

La expresión anterior, [3.32], ha sido obtenida para la orientación (001). Para otras orientaciones la dependencia funcional respecto a  $\phi$  es la misma, y la diferencia vendrá dada por las funciones  $q(z_p)$ ,  $r(z_p)$  y  $s(z_p)$ .

## 3.6 Transición de fase

Según ha quedado establecido en la sección anterior, la densidad de energía libre de la heteroestructura puede ser descrita en la aproximación de campo medio, mediante la expresión [3.32].

Aplicaremos a continuación la teoría de Landau de transiciones de fase [LL 67] a esta densidad de energía libre, para obtener el diagrama de fases de la transición 2D-3D en el modelo de crecimiento de SK.

La variable  $\phi$ , pendiente cuadrática media, juega el papel de un *parámetro de orden* en esta teoría. Si su valor es nulo, la heteroestructura crece plana. Si su valor es distinto de cero, el crecimiento es tridimensional. Nótese que, en esta aproximación de campo medio, es imposible obtener la *forma* que adopta la película: si se trata de una figura geométrica simple como un cono, una pirámide o una gaussiana, que podría dar lugar a un punto cuántico, o si se trata de una estructura rugosa invariante de escala.

Para que la expresión de la densidad de energía [3.32] tenga sentido, el coeficiente del término de mayor grado,  $s(z_p)$  debe ser positivo. De otro modo, resulta imposible minimizar la energía libre al no estar acotada. Este término para la orientación (001) viene dado por la expresión:

$$s(z_p) = \frac{1}{32} (3c_{11}^p + c_{12}^p + 2c_{44}^p) z_p. \quad [3.33]$$

Como se puede apreciar, es siempre positivo, debido a que las constantes elásticas son positivas.

Para obtener el valor de equilibrio del parámetro de orden, debemos derivar la expresión [3.32] con respecto a  $\phi$  e igualar a cero:

$$0 = 2r(z_p)\phi + 4s(z_p)\phi^3 = 2\phi (r(z_p) + 2s(z_p)\phi^2). \quad [3.34]$$

Esta ecuación siempre tiene la solución real  $\phi = 0$ . Si  $r(z_p) > 0$ , esta solución corresponde con un mínimo de la energía (ver figura 3.2, curva  $z_p < z_t$ ). En caso contrario, aparecen otras dos soluciones reales,  $\phi = \pm\phi_{3D}(z_p)$  (ver figura 3.2, curva  $z_p > z_t$ ). En caso de existir, estas últimas serán los mínimos de la energía, y  $\phi = 0$  se convierte en un máximo local.

En la teoría de Landau, esto implica que la transición de fase es de *segundo orden*, para un valor del *espesor de transición*  $z_t$ . Para  $z_p$  menor que el valor de transición, la única solución  $\phi = 0$  implica que el crecimiento debe ser plano. Cuando  $z_p > z_t$ , el valor finito de  $\phi$  implica que la estructura es tridimensional, aunque no podamos afirmar nada más sobre su geometría.

La figura 3.3 muestra la densidad superficial de energía  $f(\phi, z_p)$ , donde es posible apreciar la transición de fase en el momento en el que el mínimo para  $\phi = 0$  se convierte en un máximo local, desarrollándose los dos mínimos laterales  $\pm\phi_{3D}$ , que se van separando hasta alcanzar un valor asintótico cuando  $z_p \rightarrow \infty$ .

Por tanto, el criterio para localizar la transición de fase es el signo de  $r(z_p)$ . Analizaremos a continuación la expresión para dicho término:

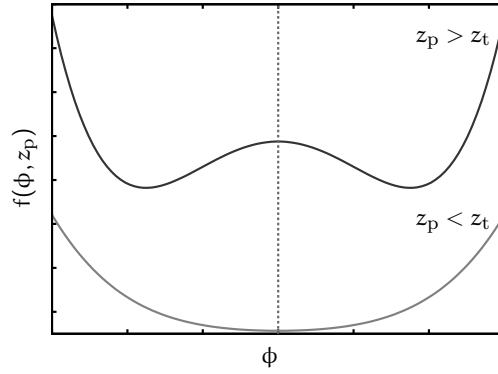


FIGURA 3.2. Densidad de energía en función de la pendiente para dos alturas diferentes, antes y después de la transición a  $z_t$ .

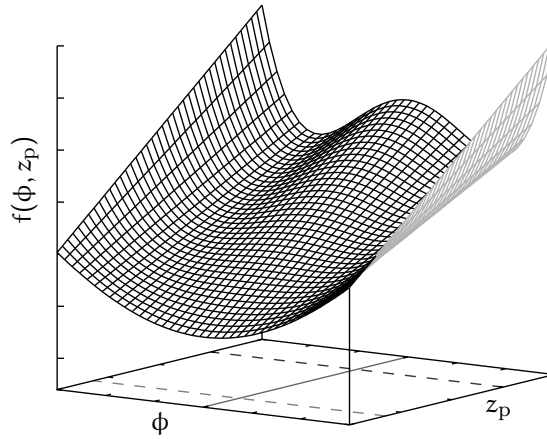


FIGURA 3.3. Densidad superficial de energía en función de la pendiente media  $\phi$  y de la cantidad de película depositada  $z_p$ .

$$r(z_p) = \frac{1}{2}\gamma_p \left( \frac{a(z_p)}{a_p} \right)^2 + \frac{1}{2} (c_{11}^p + c_{12}^p) \int_0^{z_p} \left( \delta_p(z) + \frac{1}{2}\delta_p(z)^2 \right) dz. \quad [3.35]$$

El primer término representa la energía superficial y es siempre positivo. El signo del segundo término viene determinado por el de la integral. En este caso, como  $a_p > a_s$ ,  $\delta_p(z_p)$  es siempre negativo. Al ser  $|\delta_p(z_p)| \ll 1$ ,  $\delta_p^2(z_p)$  es despreciable en una primera aproximación, y así el segundo término, que representa la energía elástica, es (casi) siempre negativo. De esta manera, es un balance entre la energía elástica y la superficial lo que da lugar a la transición de fase.

Para dar fin a esta sección, analizaremos los valores del parámetro de orden en la fase 3D. Para ello debemos resolver la ecuación:

$$\partial_\phi f = 2r(z_p)\phi + 4s(z_p)\phi^3 = 0. \quad [3.36]$$

Siempre existe la solución  $\phi = 0$  pero, cuando el crecimiento real es 3D, dicha solución representa un máximo local de la energía libre. La solución  $\phi_{3D} > 0$  de dicha ecuación queda:

$$\phi_{3D} = \sqrt{\frac{r(z_p)}{2s(z_p)}} \quad [3.37]$$

que, como es de esperar, depende de la cantidad de película depositada y da el valor de la pendiente de la heteroestructura que hace mínima la energía en el crecimiento 3D.

## 3.7 Publicaciones

A partir de la teoría elástica continua y las aproximaciones que hemos llevado a cabo en este capítulo, se han realizado diversas publicaciones y contribuciones a congresos. A continuación destacaremos los puntos más relevantes de los artículos, los cuales están incluidos íntegramente al final de esta tesis.

### Coherent growth of InAs/GaAs self-assembled quantum dots

(Physica E, **17**, 480-483 (2003))

En este artículo se desarrolló la teoría básica expuesta en este capítulo. Utilizando un modelo de sólido isótropo, se ha estudiado la dependencia del espesor de transición con el espesor de sustrato que sufre deformación, aplicado a la heteroestructura InAs/GaAs (001). Se ha adoptado para la dependencia del parámetro de red con la altura una función de tipo sigmoide, continua en la intercara para asegurar la coherencia.

La comparación con los datos experimentales prueba que la aproximación de sustrato rígido es inapropiada. Al alcanzar el espesor de transición  $z_t$ , el sustrato se deforma notablemente hasta una profundidad  $\alpha z_t$ , con  $\alpha \approx 0.2$ .

### Stranski-Krastanov growth mode in Ge/Si (001) self-assembled quantum dots

(J. Crystal Growth **253**, 190-197 (2003))

En este trabajo se amplía el marco teórico para permitir la medida de tensiones en el material, dado que se trata de observables sobre los que existen datos experimentales. La comparación entre los resultados teóricos y los experimentales es satisfactoria. La heteroestructura estudiada en este caso es  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ , propiciando un análisis detallado del efecto de la composición en la transición de fase 2D-3D. El espesor de transición varía, en este caso, con respecto a la composición como  $1/x$ .

Como en el artículo precedente, también se realiza la hipótesis de sólido isótropo, y el estudio se realiza teniendo en cuenta la deformación del sustrato.

### Substrate orientation effects on the Stranski-Krastanov growth mode

(Nanotechnology **15**, S215-S219 (2004))

Se ha extendido el formalismo de los artículos anteriores para estudiar sólidos no isótropos, así como distintas orientaciones de la heteroestructura. Tomando como ejemplo Ge/Si(001) y

Ge/Si(111) se han relacionado la proporción de sustrato deformado y las tensiones con el espesor de transición, poniendo especial énfasis en el efecto de las diferentes orientaciones.

También en este caso se ha analizado el efecto de la composición de la película,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , sobre un sustrato de Si(111), obteniendo de nuevo una ley para el espesor de transición del tipo  $1/x$ .

### Islanding mechanism and band edges in InAs/GaAs (11n) nanostructures

(Physica E **25**, 456-465 (2005))

El estudio anterior se amplía al análisis de diversas orientaciones de la forma (11n) para la heteroestructura InAs/GaAs. El marco teórico se amplía para medir pendientes asintóticas (para valores altos de  $z_p$ , comparables con datos experimentales).

La aportación más importante de este trabajo es la relación entre la deformación del material y las propiedades electrónicas del mismo. Se ha analizado el efecto de las tensiones mecánicas en la estructura de bandas, fenómeno de gran interés tecnológico.

La deformación de un material puede tener un gran efecto sobre su estructura electrónica. Este efecto, llamado piezoelectricidad, es especialmente notable en el caso de los materiales semiconductores, debido a la pequeña magnitud del gap de energía entre la banda de valencia y la de conducción. Los puntos cuánticos semiconductores son estructuras en las que se ha producido una gran deformación respecto al material en equilibrio. Esta deformación contribuye notablemente a la localización de los electrones, que es la principal razón de su utilidad práctica.

---

## 4. Minimización exacta de la energía elástica

---

### 4.1 Introducción

En el capítulo anterior, la energía elástica fue minimizada en la aproximación de campo medio y la expresión del parámetro de red como función de  $z$  se suponía conocida. Dicha aproximación nos permitió obtener una imagen simplificada de la transición de fase 2D-3D del modo de crecimiento Stranski-Krastanov en función de pocos parámetros. En este capítulo, mantendremos la aproximación de campo medio pero no supondremos ninguna forma funcional para el parámetro de red deformado, éste lo obtendremos minimizando la energía elástica mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange para campos [BAR 80].

El cálculo está orientado a la minimización de la energía elástica

$$F = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{v}} C^{ijkl} u_{ij} u_{kl} d\mathbf{v} \quad [4.1]$$

despreciando la contribución de la energía superficial, siendo conscientes de que dicho término favorece el crecimiento plano. El tensor de deformaciones adoptado será el de Cauchy,

$$u_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad [4.2]$$

que es la parte lineal de la forma más general dada por Lagrange<sup>[1]</sup>. Dicho tensor se obtendrá a partir del vector desplazamiento dado por la siguiente expresión:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{a(z)}{a_p} x - x \\ \frac{a(z)}{a_p} y - y \\ u_3(x, y, z) \end{pmatrix} \quad [4.3]$$

donde  $a(z)$  es el parámetro de red deformado, que sólo depende de la coordenada  $z$  del cuerpo sin deformar. De esta manera, la energía es, en principio, un *funcional* de los campos  $a(z)$  y  $u_3(x, y, z)$ .

---

[1] Nos restringimos a la parte lineal, dado que queremos que el cálculo sea analítico en la medida de lo posible.

El cálculo se realizará sobre regiones finitas del sustrato sobre las que se impone la condición de crecimiento coherente. Una muestra de tamaño macroscópico estará compuesta por muchas de estas regiones finitas, cada una de las cuales puede contener una isla de crecimiento tridimensional que daría lugar, bajo las condiciones apropiadas, a un punto cuántico. El problema de las fronteras entre estas regiones posee un gran interés, y será desarrollado en un trabajo futuro.

En la siguiente sección analizaremos, bajo la aproximación de campo medio, la dependencia del parámetro de red con la coordenada  $z$ , considerando sustrato no rígido. Realizaremos el cálculo en la orientación (001) del sustrato, sin pérdida de generalidad. Para otras orientaciones habrá que tener en cuenta la rotación del tensor de constantes elásticas  $C^{ijkl}$ . Para la orientación (001), la densidad de energía elástica queda descrita por:

$$f = \frac{1}{2} c_{11} (u_{11}^2 + u_{22}^2 + u_{33}^2) + c_{12} (u_{11}u_{22} + u_{22}u_{33} + u_{33}u_{11}) + 2c_{44} (u_{12}^2 + u_{23}^2 + u_{31}^2), \quad [4.4]$$

donde hemos usado las constantes elásticas en notación reducida.

## 4.2 Parámetro de red en aproximación de campo medio

Como se ha dicho, en esta sección obtendremos el parámetro de red deformado como función de la coordenada  $z$  en aproximación de campo medio, minimizando la energía mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange. Por simplicidad, consideraremos la componente vertical de la deformación, tanto para la película como para el sustrato, independiente de la coordenada  $z$ .

Por sencillez conceptual, descompondremos la función  $a(z)$  que describe el parámetro de red de la heteroestructura en una parte para el sustrato,  $a_s(z)$ , cuando  $z < 0$ , y otra parte para la película,  $a_p(z)$ , con  $z > 0$ . Lógicamente,  $z = 0$  representará la *intercara*. El sustrato tiene un parámetro de red menor que el de la película para las heteroestructuras estudiadas. De esta manera, la hipótesis de coherencia impone que el sustrato se *estire* en la vecindad de la intercara. Así, no existe tendencia a la deformación tridimensional en el mismo.

Los vectores desplazamiento para la película y el sustrato serán respectivamente

$$\mathbf{u}_p = \begin{pmatrix} \frac{a_p(z)}{a_p} x - x \\ \frac{a_p(z)}{a_p} y - y \\ h(x, y) \end{pmatrix} \quad \mathbf{u}_s = \begin{pmatrix} \frac{a_s(z)}{a_s} x - x \\ \frac{a_s(z)}{a_s} y - y \\ k \end{pmatrix} \quad [4.5]$$

a partir de los cuales podemos calcular la energía elástica.

La aproximación más importante en los cálculos subsiguientes es ésta: las derivadas de  $h(x, y)$  con respecto a  $x$  e  $y$  se supondrán constantes. Esto es equivalente a la aproximación de campo medio considerada en el capítulo anterior. Con esta aproximación, la energía elástica se puede escribir como la integral en la coordenada  $z$  de un funcional de los parámetros de red de la película y el sustrato

$$F = \int dz \mathcal{F}(a_p(z), a_p'(z), a_s(z), a_s'(z); z) = \int_{-z_s}^0 dz \mathcal{F}_s(a_s(z), a_s'(z); z) + \int_0^{z_p} dz \mathcal{F}_p(a_p(z), a_p'(z); z). \quad [4.6]$$

Se puede observar que ambas partes, sustrato y película, quedan desacopladas y que el efecto de uno sobre el otro solo se puede dar a  $z = 0$ , la intercara.

Las ecuaciones de Euler-Lagrange para la energía anterior son:

$$\frac{\delta \mathcal{F}_j}{\delta a_j(z)} = \frac{\partial \mathcal{F}_j}{\partial a_j(z)} - \frac{d}{dz} \frac{\partial \mathcal{F}_j}{\partial a'_j(z)} = 0 \quad [4.7]$$

donde  $j$  denotará al sustrato con  $s$  o a la película con  $p$ .

De la solución de cada una de las dos ecuaciones anteriores obtenemos las siguientes ecuaciones para los parámetros de red:

$$a''_j(z) = 24 \frac{a_j(c_{11}^j + c_{12}^j)}{(A^2 + B^2)c_{44}^j} \left( \frac{a_j(z)}{a_j} - 1 \right) \quad [4.8]$$

donde las dimensiones horizontales serán  $A \times B$ . La solución genérica a dicha ecuación viene dada por la expresión:

$$a_j(z) = N_j \exp(\lambda_j z) + M_j \exp(-\lambda_j z) + a_j \quad [4.9]$$

con

$$\lambda_j = 2 \sqrt{\frac{6a_j(c_{11}^j + c_{12}^j)}{(A^2 + B^2)c_{44}^j}} \quad [4.10]$$

dando como expresión final para el parámetro de red en toda la región

$$a(z) = \Theta(-z)a_s(z) + \Theta(z)a_p(z) \quad [4.11]$$

donde  $\Theta(z)$  y  $\Theta(-z)$  son las funciones de Heaviside que separan la parte de la deformación del sustrato y de la película en la intercara.

Las constantes en estas ecuaciones se fijan mediante las condiciones de contorno. Éstas son:

- a. El parámetro de red de equilibrio del sustrato se recupera para  $z = -z_s = -\alpha z_p$ , con  $\alpha \in [0, 1]$ , es decir, cuando éste deja de deformarse.

$$a_s(-z_s) = a_s. \quad [4.12]$$

- b. El parámetro de red de equilibrio de la película se recupera si se deposita una cantidad *infinita* de material.

$$\lim_{z_p \rightarrow \infty} a_p(z_p) = a_p. \quad [4.13]$$

- c. Condición de crecimiento coherente: el parámetro de red del sustrato en la intercara es el mismo que el de la película.

$$a_s(0) = a_p(0) = a_i. \quad [4.14]$$

- d. Las funciones que se obtienen para representar el parámetro de red del sustrato y de la película en función de la coordenada  $z$  *empalman* suavemente.

$$a'_s(0) = a'_p(0). \quad [4.15]$$

De esta manera, obtenemos como solución completa para  $a(z)$  la siguiente expresión:



$$a(z) = \Theta(-z) \left[ \frac{4(a_i - a_s)}{\sinh(\lambda_s z_s)} \sinh(\lambda_s(z + z_s)) + a_s \right] + \Theta(z) \left[ (a_i - a_p) \exp(-\lambda_p z) + a_p \right] \quad [4.16]$$

donde  $a_i$  representa el valor del parámetro de red en la intercara cuyo valor es:

$$a_i = \frac{\lambda_s a_s \cosh(\lambda_s z_s) + \lambda_p a_p \sinh(\lambda_s z_s)}{\lambda_s \cosh(\lambda_s z_s) + \lambda_p \sinh(\lambda_s z_s)}. \quad [4.17]$$

Hemos aplicado este resultado al crecimiento de Ge/Si(001) e InAs/GaAs(001). En ambos casos se obtiene una forma de tipo sigmoide para el parámetro de red, justificando la elección hecha en las publicaciones expuestas en el capítulo anterior.

### 4.3 Publicaciones y trabajos futuros

La minimización del funcional de energía elástica con respecto a sus campos ha dado lugar a un trabajo ya publicado y abre camino, de forma inmediata, a otras dos extensiones.

#### On the lattice parameter profiles in the Stranski-Krastanov growth mode

(Nanotechnology **18**, 315705 1-6 (2007))

Dentro de la aproximación de campo medio y considerando tanto sustrato rígido como no rígido, se ha obtenido el parámetro de red horizontal de la heteroestructura utilizando la ecuaciones de Euler-Lagrange para minimizar la energía elástica, como aparece expuesto en la sección 4.2. Esta teoría se ha aplicado a las heteroestructuras Ge/Si (001) e InAs/GaAs (001). Los cálculos proporcionan una forma tipo sigmoide para el parámetro de red, en consonancia con la hipótesis realizada en el capítulo anterior.

#### Otros trabajos

Como primera extensión del trabajo realizado, pasamos a considerar el estudio del efecto de las distintas orientaciones del sustrato en la dependencia del parámetro de red de la heteroestructura con la coordenada  $z$ . El procedimiento a seguir es una extensión lógica de lo expuesto en el capítulo 2. Es preciso rotar el tensor de constantes elásticas de manera apropiada. En particular, estamos interesados en las orientaciones de la forma (11n), debido a la abundancia de datos experimentales al respecto.

Una extensión posterior es la minimización de la energía respecto a la tercera componente del vector desplazamiento considerando el parámetro de red obtenido en el trabajo aquí presentado. Esto nos permitirá predecir el perfil de altura de las heteroestructuras y así las formas de las islas.

---

## 5. Enfoque semiatomístico

---

### 5.1 Introducción

En este capítulo presentaremos un modelo semiatomístico para el estudio de la estabilidad de heteroestructuras y la formación de islas. El modelo que presentamos es una extensión del que propusieron inicialmente J. Frenkel y T. Kontorova en 1938 para estudiar deformaciones plásticas y *twinning* [FK 38].

En el modelo original de Frenkel-Kontorova (FK) se considera una heteroestructura formada por un sustrato rígido y una capa de película. Considerando un modelo unidimensional, el sustrato es representado mediante un potencial sinusoidal de periodicidad  $a_s$ , el parámetro del sustrato en equilibrio. Sobre este potencial se sitúan los átomos de la película, que están ligados entre sí mediante *muelles armónicos* de longitud de equilibrio correspondiente al parámetro de red del material depositado,  $a_p$ . La energía de la heteroestructura será la suma de dos términos. Por un lado, la suma de las energías de cada átomo de la película debido a su posición sobre el sustrato. Por el otro lado, la suma de las energías de interacción entre los pares de átomos vecinos de la película.

$$E[x_i] = \sum_{i=1}^N K_s \cos\left(\frac{2\pi x_i}{a_s}\right) + \sum_{i=1}^{N-1} K_p (x_{i+1} - x_i - a_p)^2 \quad [5.1]$$

donde las constantes  $K_s$  y  $K_p$  proporcionan una medida de la interacción sustrato-película y película-película, respectivamente.

Fundamentalmente, se han incorporado dos tipos de mejoras a este modelo. El primer tipo consiste en utilizar *potenciales anarmónicos* para describir la interacción entre los átomos de la película [MT 88]. El segundo consiste en la extensión a dos dimensiones, cambiando el potencial del sustrato por un potencial tipo huevera, manteniendo la energía entre átomos de la película de tipo armónico [BK 04].

En este trabajo, incluimos en el modelo de FK interacciones anarmónicas entre los átomos de la película, y extendemos el potencial creado por el sustrato en la dirección perpendicular al mismo. Con estas modificaciones el modelo pasa a ser  $1 + 1D$ , donde queremos denotar que

no incrementamos la dimensionalidad del modelo, sino que realizamos una *extensión vertical* del mismo.

## 5.2 Potenciales anarmónicos entre los átomos de la película

El estudio de los potenciales interatómicos tiene una gran tradición en la literatura [MT 88]. En términos generales, cualquier potencial debe tener una distancia de equilibrio, y una región en torno a ella donde su comportamiento sea armónico. Además, debe cumplir las siguientes condiciones:

- fuera de la región armónica, debe ser más fácil separar dos átomos que juntarlos y
- la libertad asintótica, la interacción se hace nula cuando la distancia tiende a infinito.

Hay muchos potenciales que cumplen estas condiciones en la literatura, y la mayoría de los detalles en torno a ellos es irrelevante para la física de nuestro problema. Consideraremos dos de estos potenciales: el de *Mie* y el de *Markov*<sup>[1]</sup> [MT 88]. Las expresiones correspondientes son:

$$V_p(d) = \frac{A_0}{\mu_p - \nu_p} \left[ \nu_p \left( \frac{a_p}{d} \right)^{\mu_p} - \mu_p \left( \frac{a_p}{d} \right)^{\nu_p} \right] \quad [5.2]$$

para el de Mie y

$$V_p(d) = \frac{A_0}{\alpha_p - \beta_p} \left[ \beta_p \exp(-\alpha_p(d - a_p)) - \alpha_p \exp(-\beta_p(d - a_p)) \right] \quad [5.3]$$

para el de Markov. En ambos casos,  $d \equiv |\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|$  es la distancia real entre átomos consecutivos de la película,  $a_p$  es su distancia de equilibrio y  $A_0$  nos da la profundidad del pozo. Por último, los exponentes han de cumplir  $\mu_p > \nu_p$  en [5.2] y  $\alpha_p > \beta_p$  en [5.3]. En la figura 5.1 podemos ver ambos potenciales superpuestos para determinados valores de sus parámetros.

Nótese que ambos potenciales dependen de cuatro parámetros, los cuales se han de determinar en cada caso particular.

## 5.3 Extensión vertical del modelo de Frenkel-Kontorova unidimensional

La energía de la heteroestructura comprenderá la parte referida a la película más la correspondiente al sustrato. Debido a la extensión vertical del modelo unidimensional, la posición  $\mathbf{r}_i$  del átomo  $i$ -ésimo será un vector de dos dimensiones  $\mathbf{r}_i = (x_i, z_i)$ , donde  $x_i$  es la coordenada en el eje horizontal (el único grado de libertad en el modelo original) y  $z_i$  la distancia entre el átomo y el sustrato (la extensión vertical).

La energía correspondiente al sistema será, formalmente,

$$E[\{\mathbf{r}_i\}] = \sum_{i=1}^N V_s(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^{N-1} V_p(|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|) \quad [5.4]$$

donde  $V_p$  puede ser cualquiera de los dos potenciales anteriores, [5.2] o [5.3].

---

[1] Ambos potenciales son casos generales de los potenciales de Lenard-Jones y Morse, respectivamente.

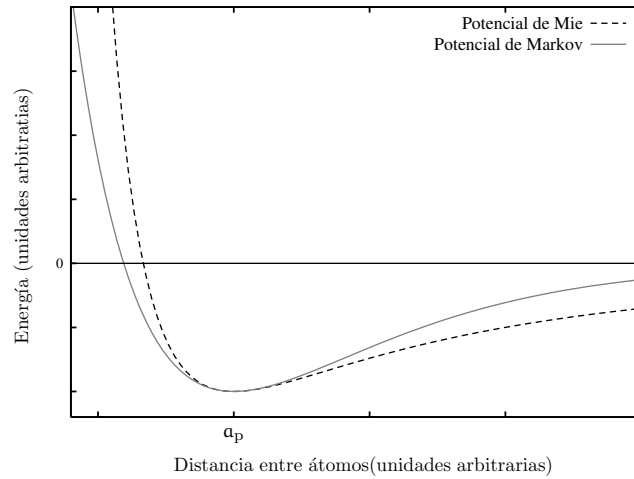


FIGURA 5.1. Potenciales anarmónicos de Markov y Mie, con parámetros escogidos de manera que la posición del mínimo, su profundidad y la curvatura en torno a éste son iguales. Nótese que cualitativamente tienen un comportamiento similar.

El potencial del sustrato de FK es extendido en la dirección vertical ( $z$ ) de tal manera que para la altura de equilibrio  $z = z_{eq}$  se recupere el potencial sinusoidal del modelo original. Las condiciones sobre la dependencia en la altura del potencial del sustrato son similares a las de la película:

- a. libertad asintótica en el eje  $Z$ ,
- b. barrera de potencial muy elevada a la altura del sustrato.

Debido a la similaridad entre las condiciones, construiremos el potencial del sustrato como alguno de los potenciales considerados para la película en el eje  $Z$  *modulado* por una función sinusoidal en el eje  $X$ .

Eligiendo el potencial de Mie para la extensión vertical se obtiene:

$$V_s(x, z) = \frac{B_0}{\mu_s - \nu_s} \left[ \nu_s \left( \frac{z_{eq}}{z} \right)^{\mu_s} - \mu_s \left( \frac{z_{eq}}{z} \right)^{\nu_s} \frac{1}{2} \left( \cos \left( \frac{2\pi x}{a_s} \right) + 1 \right) \right] \quad [5.5]$$

donde  $B_0$ ,  $\mu_s$  y  $\nu_s$  son constantes<sup>[2]</sup>. El término modulador está calculado para que el promedio del potencial sea cero en  $z = z_{eq}$ . Para  $z < z_{eq}$  este valor promedio es positivo, y es negativo para  $z > z_{eq}$ , aunque tendiendo a cero. Esto asegura que el estado fundamental estará siempre ligado al sustrato. La figura 5.2 muestra este potencial para ciertos valores típicos de sus parámetros. Se puede ver que toma valores altos cerca del sustrato y cero para grandes alturas. Hay una cadena de mínimos con sus correspondientes pasillos, separados por barreras de potencial, cuya altura decrece con  $z$ . La vista de contorno, en el plano horizontal, muestra elipses cuyos centros se corresponden con los mínimos.

De esta manera, los cinco parámetros que determinan el potencial del sustrato son los siguientes:  $B_0$  marca la profundidad de los mínimos, cuyas posiciones vienen determinadas por  $a_s$  y  $z_{eq}$ . La concavidad en torno a los mínimos viene dada por los exponentes  $\nu_s$  y  $\mu_s$ .

[2] Si se deseara realizar la misma extensión vertical utilizando el potencial de Markov, sería el término de menor exponente el que vendría modulado por la función sinusoidal.

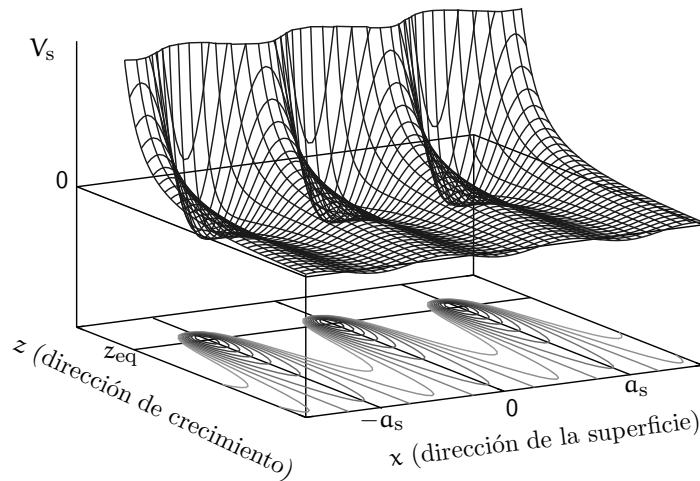


FIGURA 5.2. Potencial del sustrato 1 + 1D. El plano horizontal muestra el eje de la superficie y el de crecimiento. El eje vertical marca el valor del potencial. Nótese que la superficie está compuesta por carriles periódicos, cada uno de los cuales culmina en un mínimo. Esta imagen queda completada por la vista de contorno, donde se pueden observar las elipses correspondientes a las cuencas de cada uno de dichos mínimos.

La energía total, dada por la expresión [5.4], es minimizada a continuación con el fin de obtener la configuración de equilibrio de la heteroestructura. En principio, cualquier técnica de minimización no lineal es apropiada para el estudio de este problema. Desafortunadamente, éste carece de solución analítica exacta, aunque existen varias técnicas aproximadas de solución, tanto analíticas como numéricas.

En la práctica, esta forma para la energía constituye una función de muchas variables con gran cantidad de mínimos locales (o estados metaestables) que, un método de minimización poco cuidadoso, puede considerar absolutos. En la siguiente sección se presentan dos técnicas aproximadas de muy distinta naturaleza que dan lugar a diagramas de fases muy similares. Una de ellas está basada en un *Ansatz* analítico, y la otra consiste en una aplicación numérica del grupo de renormalización en espacio real.

Este modelo 1 + 1D es aplicable en algunas situaciones físicas de interés. Considérese, por ejemplo, un cristal de germanio mostrando la orientación (001) (ver figura 5.3). Nótese cómo los enlaces de la última capa están fuertemente direccionados, formando cadenas unidimensionales. En el caso de la figura, en la dirección  $[1, \bar{1}, 0]$ . La capa anterior tiene sus enlaces en la dirección perpendicular. Asimismo, en superficies constituidas por surcos (*furrows*) ampliamente separados, como en la orientación (112) de un cristal cúbico centrado en cuerpo, los átomos de la película formarán cadenas unidimensionales independientes.

## 5.4 Diagrama de fases del modelo de FK verticalmente extendido

El objetivo de esta sección es encontrar el diagrama de fases del modelo de Frenkel-Kontorova verticalmente extendido. Como parámetros de control tomaremos el cociente entre el parámetro de red de la película,  $a_p$ , y el del sustrato,  $a_s$ , y una medida de la fuerza relativa de los enlaces de la película con respecto a los del sustrato. Esta medida nos la proporcionará el cociente entre

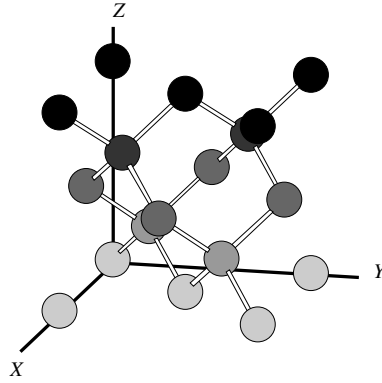


FIGURA 5.3. Estructura diamante en la orientación (001). Nótese cómo los enlaces entre capas van orientándose alternativamente en las direcciones  $[1, \bar{1}, 0]$  y  $[1, 1, 0]$ .

las concavidades de ambos potenciales en torno a sus puntos de equilibrio, que llamaremos  $k$ . El parámetro de orden será la *rugosidad* de la película, es decir: consideraremos la transición de fase entre crecimiento plano y crecimiento tridimensional o rugoso. Como medida de dicha rugosidad se puede considerar la varianza en las alturas de las posiciones de los átomos de la película. Un valor cero indica crecimiento plano.

Como técnica analítica aproximada hemos considerado un Ansatz de la siguiente forma. Consideraremos que todos los átomos toman la coordenada  $x$  correspondiente al equilibrio. En cambio, una fracción  $p$  de los mismos abandonan la altura de equilibrio para adoptar un nuevo valor  $z = z_1$ . El resto, permanece a  $z = z_{eq}$ , y supondremos que los átomos desviados están regularmente espaciados en la cadena. Para  $p = 1/2$ , tenemos una cadena en *zig-zag*.

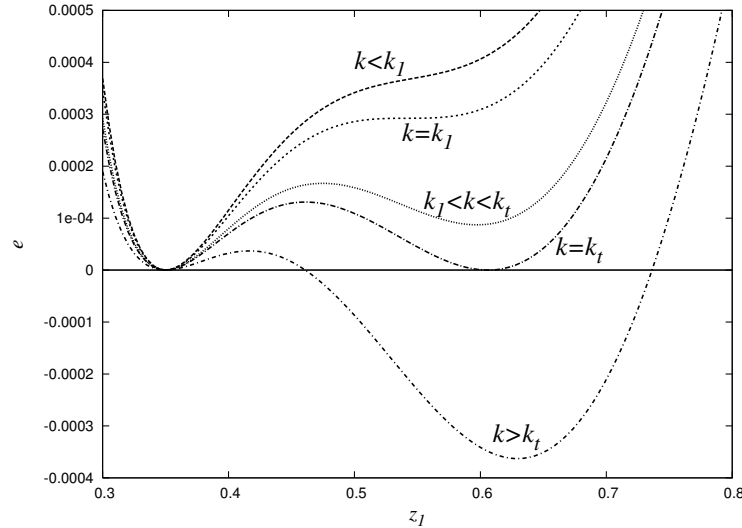


FIGURA 5.4. Energía por átomo  $e(z_1)$  en función de la altura de los átomos que abandonan la altura de equilibrio, para distintos valores de  $k$ . Obsérvese cómo para  $k > k_1$  aparece un segundo mínimo para  $z_1 > z_{eq}$ , y que este mínimo pasa a tener menor energía que la configuración plana para  $k > k_t$ .

Mediante este Ansatz obtenemos, para distintos valores de  $p$ , la función  $e(z_1)$  que proporciona la energía por partícula de la cadena total *menos* dicho valor para la configuración plana. Esta función presenta siempre un punto crítico en  $z_1 = z_{eq}$ , es decir: la configuración plana siempre es

de equilibrio, aunque no siempre sea de equilibrio *estable*. La figura 5.4 muestra dicha función para distintos valores de  $k$ , fijando el resto de los parámetros del problema. Nótese que, para  $k$  mayor que cierto valor  $k_1$ , aparece un segundo mínimo para  $z_1 > z_{eq}$ , pero que la energía de este mínimo no es menor que la de la configuración plana hasta que  $k = k_t$ , el valor que marca la transición de fase. El mínimo correspondiente a la configuración plana se convierte en este momento en un estado *metaestable*. De esta manera, se obtiene un diagrama de fases aproximado para la transición de rugosidad en el modelo (ver figura 5.5).

En combinación con la técnica analítica expuesta, hemos empleado una variedad de métodos numéricos con el fin de obtener el diagrama de fases del modelo. El método que resultó más eficaz está basado en ideas tomadas del grupo de renormalización en espacio real.

Dicho método consiste en encontrar un potencial efectivo para el movimiento de una partícula al extremo de una cadena finita, de manera que todos los átomos de ésta encuentren siempre su posición de equilibrio global. En el caso de una única partícula, dicho potencial efectivo coincide con el del sustrato. A partir de este punto, hemos desarrollado una formulación recursiva, que nos da el potencial efectivo para una partícula al extremo de una cadena de  $N$  átomos en función del potencial efectivo para  $N - 1$  átomos. Encontrando los puntos fijos de dicho flujo de renormalización obtenemos el diagrama de fases en el límite termodinámico. Asimismo, integrando la relación para distintos valores de  $N$  obtenemos interesantes efectos de tamaño finito en la estabilidad de las distintas fases.

Aplicando este método, obtenemos el diagrama de fases que se muestra en la figura 5.5. Nótese cómo las fronteras de fase obtenidas mediante el método analítico y el método numérico resultan muy similares.

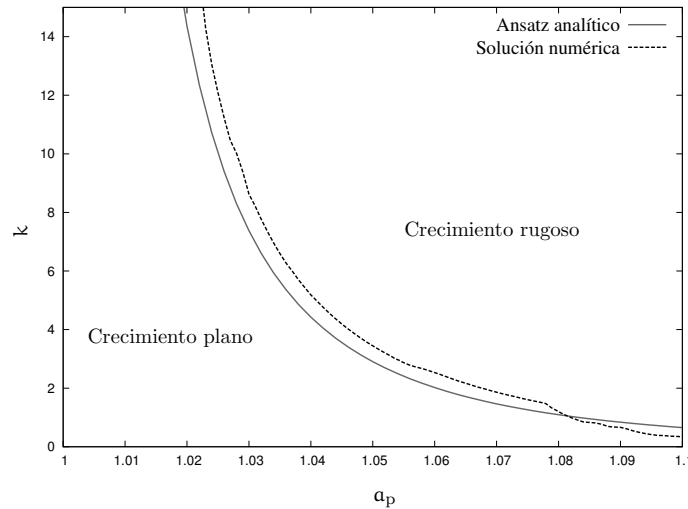


FIGURA 5.5. Diagrama de fases en el plano  $a_p$ - $k$  en el límite termodinámico, calculado de manera analítica (línea continua) y numérica (línea discontinua). Obsérvese la notable coincidencia entre las dos curvas.

## 5.5 Publicaciones y trabajos futuros

En esta sección comentamos el artículo sobre el modelo de Frenkel-Kontorova extendido verticalmente y hacemos una rápida revisión del plan de trabajo futuro en este campo.

### Vertical extended Frenkel-Kontorova model model: A real space renormalization group study

(Phy. Rev. B **72**, 125412 1-8 (2005))

Este artículo introduce la extensión vertical del modelo de Frenkel-Kontorova en  $1 + 1D$ . Tras estudiar los requisitos físicos para el potencial del sustrato y de la película, se proponen formas concretas para éstos, basados en los potenciales de Mie. El objetivo final del análisis es obtener el diagrama de fases de la transición de rugosidad en el modelo. Este diagrama se obtiene de dos maneras: mediante un *Ansatz* analítico y mediante una técnica numérica en base al grupo de renormalización. Los dos diagramas coinciden apreciablemente bien. Se trata de un trabajo de diferente índole al resto de los que forman parte de esta tesis, sin aplicación *directa* a ningún tipo de material.

### Otros trabajos

Con el fin de aplicar el modelo de Frenkel-Kontorova extendido verticalmente al análisis de materiales semiconductores reales es preciso realizar ulteriores extensiones. La más importante es la inclusión de *potenciales a tres cuerpos* que den cuenta de la alta direccionalidad de los enlaces covalentes. En un trabajo futuro se obtendrá el efecto de dicho potencial sobre el diagrama de fases del modelo. Es también posible, siguiendo en el mismo marco conceptual, estudiar el efecto de la temperatura finita sobre el modelo, empleando las mismas técnicas que se han expuesto en este capítulo.

Una extensión que resulta también imprescindible es el paso a un modelo  $2 + 1D$ , en el que el sustrato sea bidimensional. La extensión vertical del sustrato se obtiene de la misma manera, pero su forma en el plano  $(x, y)$  se determina mediante una combinación de ondas planas con la simetría apropiada. En este caso, las técnicas para la obtención del diagrama de fases han de extenderse, debido a que los métodos expuestos en este capítulo son esencialmente unidimensionales.





---

## Conclusiones y trabajo futuro

---

### APROXIMACIÓN DE CAMPO MEDIO

A partir de la teoría elástica continua tomamos una aproximación de campo medio para caracterizar la transición de fase 2D-3D típica del modo de crecimiento de Stranski-Krastanov de distintas heteroestructuras semiconductoras como son Ge/Si e InAs/GaAs teniendo en cuenta los efectos de orientación del sustrato. Desde el punto de vista teórico, se obtiene una transición de segundo orden. Tomando como dato el valor del espesor de transición en cada una de las heteroestructuras y una forma funcional del parámetro de red con la altura tipo sigmoide se obtiene:

- La estimación de la cantidad de sustrato que se deforma en vías de conseguir que el crecimiento sea coherente en la intercara.
- El valor asintótico de las pendientes promedios de la película depositada.

Y en base a estos resultados, podemos predecir:

- La tensión acumulada de la heteroestructura.
- La dependencia del espesor de transición con la composición de la película.
- La modificación de las propiedades electrónicas, bandas de conducción y de valencia, debido a las deformaciones que sufren la película y el sustrato.

### MINIMIZACIÓN EXACTA DE LA ENERGÍA ELÁSTICA

Dentro de la aproximación de campo medio, minimizamos la energía elástica como funcional del parámetro de red y obtenemos la forma del mismo para las heteroestructuras Ge/Si(001) e InAs/GaAs(001) obteniendo:

- La dependencia del parámetro de red con la coordenada  $z$  es tipo sigmoide, lo que viene a confirmar la elección que habíamos tomado para trabajos anteriores.

Y trabajando con esta teoría planteamos como trabajo futuro:

- Buscar la dependencia del parámetro de red con la coordenada  $z$  para heteroestructuras del tipo Ge/Si(11n) e InAs/GaAs(11n).
- Obtención de la forma de las islas que minimiza la energía elástica.

## ENFOQUE SEMIATOMÍSTICO

La extensión del modelo de Frenkel-Kontoroca a  $1 + 1D$  con potenciales anarmónicos que describen las interacciones entre los átomos de la película, nos ha llevado a:

- Obtener un diagrama de fases que nos marque la transición 2D a 3D para distintos valores del desajuste y la fuerza relativa de los enlaces, obteniendo el resultado a partir de un Ansatz analítico y un cálculo numérico.

Y abre camino a:

- Incluir en el modelo  $1 + 1D$  un potencial a tres cuerpos entre los átomos de la película.
- Extender el modelo 2D a  $2 + 1D$  permitiendo así el estudio de heteroestructuras reales.

---

## Bibliografía

---

- [ALF 01] Z. I. ALFEROV, *Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology*, Rev. Mod. Phys. **73**, 3, 767-782 (2001).
- [AM 76] N. W. ASHCROFT, N. D. MERMIN, *Solid State Physics*, Sanders College Publishing (1976).
- [AS 82] Y. ARAKAWA, H. SAKAKI, *Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current*, Appl. Phys. Lett. **40**, 939-941 (1982).
- [BAR 80] A. O. BARUT, *Electrodynamics and Classical Theory of Fields and Particles*, Dover Publications (1980).
- [BDFN 93] J. J. BINNEY, N. J. DOWRICK, A. J. FISHER, M. E.J. NEWMAN, *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford University Press (1993).
- [BK 04] O. M. BRAUN, Y. S. KIVSHAR, *The Frenkel-Kontorova Model*, Springer (2004).
- [BSN 04] R. E. BAILEY, A. M. SMITH, S. NIE, *Quantum dots in biology and medicine*, Physica E **25**, 1-12 (2004).
- [BR 00] R. A. BUDIMAN, H. E. RUDA, *Relaxation model of coherent island formation in heteroepitaxial thin films*, J. Appl. Phys. **88**, 4586-1594 (2000).
- [BS 95] A. -L. BARABÁSI, H. E. STANLEY, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University press (1995).
- [BUR 03] K. BURKE AND FRIENDS, *The ABC of DFT*, <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta> (2003).
- [BV 01] K. BARNHAM, D. VVEDENSKY, *Low-dimensional semiconductor structures: fundamentals and device applications*, Cambridge University press (2001).
- [DWH 74] R. DINGLE, W. WIEGMANN, C.H. HENRY, *Quantum states of confined carriers in very thin  $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$  heterostructures*, Phys. Rev. Lett. **33**, 14, 827-830 (1974).
- [EO 84] A. I. EKIMOV, A. L. ONUSHENKO, JETP Lett. **40**, 1137 (1984).
- [ESA 73] L. ESAKI, *Long journey into tunnelling*, Nobel Lecture (1973), <http://nobelprize.org/>
- [ET 70] L. ESAKI, R. TSU, *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*, IBM J. Res. Devel. **14**, 61 (1970).
- [FK 38] J. FRENKEL, T. KONTOROVA, Phys. Z. Sowjetunion **13**, 1 (1938); J. Phys. USSR **1**, 137 (1939).
- [FUN 65] Y.C. FUNG, *Foundations of Solid Mechanics*, Prentice-Hall (1965).

- [FvDM 49] F. C. FRANK, J. H. VAN DER MERWE, *One-dimensional dislocations. I. Static theory*, Proc. Roy. Soc. A **198**, 205-216 (1949); *One-dimensional dislocations. II. Misfitting monolayers and oriented overgrowth*, Proc. Roy. Soc. A **198**, 216-225 (1949).
- [GLSD 04] A. A. GOLOVIN, M. S. LEVINE, T. V. SAVINA, S. H. DAVIS, *Faceting instability in the presence of wetting interactions: A mechanism for the formation of quantum dots*, Phys. Rev. B **70**, , 235342 1-11 (2004).
- [GMD 02] A. GALINDO, M. A. MARTÍN-DELGADO, *Information and computation: Classical and quantum aspects*, Rev. Mod. Phys. **74**, 2, 347-423 (2002).
- [HEP ] C. HEPBURN, *Britney's guide to semiconductor physics*, <http://britneyspears.ac/>
- [JOS 98] A. W. JOSHI, *Elements of Group Theory for Physicists*, Collège press University of Beijing (1998).
- [KHB 89] E. KAPON, D. M. HWANG, R. BHAT, *Stimulated emission in semiconductor quantum wire heterostructures*, Phys. Rev. Lett. **63**, 4, 430-433 (1989).
- [KRUG 97] J. KRUG, *Origins of scale invariance in growth processes*, Advances in Phys. **46**, 2, 139-282 (1997).
- [LB 82] LANDLOT-BÖRNSTEIN, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Springer (1982).
- [LEI 74] H. LEIPHOLZ, *Theory of Elasticity*, Noordhoff International Publishing (1974).
- [LL 67] L. D. LANDAU, E. M. LIFSHITZ, *Physique Statistique*, Vol. 5, Éditions de Mir (1967).
- [LL 86] L. D. LANDAU, E. M. LIFSHITZ, *Theory of Elasticity*, Vol. 7, 3th (revised) Edition, Pergamon Press, (1986).
- [MAR 70] R. M. MARTIN, *Elastic propieties of ZnS structure semiconductors*, Phy. Rev. B **1**, 10, 4005-4011 (1970).
- [MT 88] I. MARKOV, A. TRAYANOV, *Epitaxial interfaces with realistic inter-atomic forces*, J. Phys. C: Solid State Phys. **21** 2475-2493 (1988).
- [MUR 67] F. D. MURNAGHAU, *Finite Deformation of an Elastic Solid*, Dover Publications (1967).
- [NAK 99] K. NAKAJIMA, *Equilibrium phase diagrams for Stranski-Krastanov structure mode of III-V ternary quantum dots*, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 1875-1883 (1999).
- [NYE 90] J.F. NYE, *Physical Propierties of Crystals*, Oxford University Press (1990).
- [PGMPV 00] P. POLITI, G. GRENET, A. MARTY, A. PONCHET, J. VILLAIN, *Instabilities in crystal growth by atomic or molecular beams*, Phy. Rep. **324**, 271-404 (2000).
- [ROC 32] H. P. ROOCKSBY, *The colour of selenium ruby glasses*, J. Soc. Glass Technol. **16**, 171 (1932).
- [SB 99] V. A. SHCHUKIN, D. BIMBERG, *Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces*, Rev. Mod. Phys. **71**, 4, 1125-1171 (1999).
- [SK 04] R. D. SCHALLER, V. I. KLIMOV, *High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: Implications for solar energy conversion*, Phys. Rev. Lett. **92**, 18, 186601 1-4 (2004).
- [SK 37] I. N. STRANSKI, L. KRASTANOW, *Sitzungsberichte d. Akad. d. Wisseenschaften in Wien, Abt. IIb, Band 146*, 797 (1937).
- [TRU 52] C. TRUESDELL, *The mechanical foundations of elasticity and fluid dynamics*, J. Ration. Mech. Anal. **1** ,125-300 (1952).
- [VW 26] M. VOLMER, A. WEBER, *Z. Phys. Chem.* **119**, 277 (1926).

---

## Publicaciones

---

Para finalizar esta memoria, se incluye a continuación el texto íntegro de las publicaciones en las que se basa la presente tesis, así como la relación de artículos y presentaciones a congreso de la candidata.



# Coherent growth of InAs/GaAs self-assembled quantum dots

S.N. Santalla\*, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz

*Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid. Av. de la Universidad 30, 28911 Leganés (Madrid), Spain*

## Abstract

An energetic balance between surface and elastic strain energies based in continuum elastic theory is applied to evaluate the transition thickness in InAs/GaAs (001) self-assembled quantum dots. The growth process follows a Stranski–Krastanov (S–K) pattern, where a two–three-dimensional transition is undertaken at the so-called transition thickness. The system under investigation is a pseudomorphological structure characterized by a coherent behavior at the substrate/film interface. For the dependence of the lattice parameter with height, a sigmoidal-type function with appropriate constraints is considered. Non-rigid substrate approximation is used in the evaluation of the transition thickness and the obtained numerical values are compared with the experimental ones. From these results, it can be claimed that the non-rigid substrate approach is appropriate to explain the relaxation process in the S–K growth mode.

© 2002 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

*PACS:* 68.66.Hb; 68.65.–k; 61.46.+w

*Keywords:* Self-assembled quantum dots; Elastic continuum model; Non-rigid approximation; Transition thickness

## 1. Introduction

Since the last years, there is an increasing interest to achieve self-assembled nanostructures which are homogeneous in their sizes and shapes. In this challenge, strained and unstrained quantum dots (QDs) have been fabricated using different types of techniques. For instance, molecular beam epitaxy (MBE) technique used to grow mismatch materials based in III–V and II–VI semiconductors yields Stranski–Krastanov (S–K) structures, which are quasi-uniform in their sizes and shapes. Although the phenomenology of the S–K growth mode is well known [1], the origin of the island formation mechanism is still a subject of debate. Two models are reported in the

literature which explain the islanding mechanism. One of them suggests a continuous evolution from a flat film to three-dimensional (3D) islands [2–4], while the second one proposes an island faceting [5] by means of an abrupt overcoming of energetic barrier. Within the framework of the first model, many theories based on equilibrium considerations of the balance of strain, interface and surface energies have been developed. Some of them use atomistic calculations for the stress distribution inside the as-grown film [6], while others use continuum description of the elastic strain energy [2,7,8].

Despite the large number of works on growth process, few have been devoted to prediction of the “transition thickness”, thickness at which the bi-dimensional (2D) to 3D growth transition takes place [7,9–11]. In our previous works [10,11] we applied the continuum model to estimate the transition thickness in arbitrarily shaped InAs/GaAs (001)

\* Corresponding author. Tel.: +34-91-624-9184; fax: +34-91-624-8749.

E-mail address: [ssantall@fis.uc3m.es](mailto:ssantall@fis.uc3m.es) (S.N. Santalla).



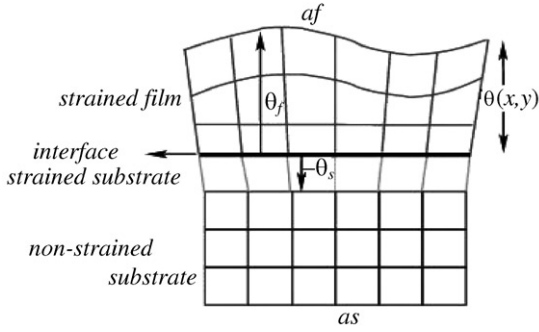


Fig. 1. Schematic representation of S-K growth pattern in the non-rigid substrate scheme.

self-assembled quantum dots (SAQDs). In these works, the relaxation process is only considered to be undertaken on the film material; this is the “rigid substrate approximation”.

In this paper, our aim is to evaluate the transition thickness in semiconductor SAQDs within the previously theoretical framework [10,11] when the substrate is also strained. This is the “non-rigid substrate approximation”. The paper is organized as follows. In Section 2, a brief description of the theoretical model is made. The implementation of the model in InAs/GaAs (001) SAQDs is developed in Section 3. Finally, the main conclusions of our results are presented in Section 4.

## 2. Theoretical model

Herein, we develop the non-rigid substrate approximation in which the relaxation process is undertaken by the film and the substrate materials. Thus, the total free energy will consist in three energy terms: surface, elastic strain of the film and elastic strain of the substrate. Fig. 1 shows the surface description, where  $(x, y)$  represent the coordinates of the planar film–substrate interface and the function  $\theta(x, y)$  is the deposited film thickness.  $\theta_f$  is the top of the island, once the 2D–3D transition occurs, and  $\theta_s$  is the substrate thickness which is strained. We assume that only a percentage of the substrate thickness is affected by deformation; thus  $|\theta_s| = \alpha\theta_f$  with  $\alpha < 1$ . In this scheme, the relaxation process is considered to take

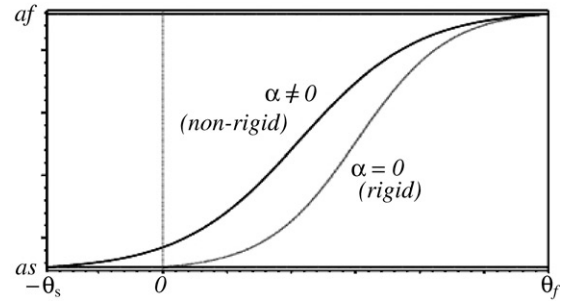


Fig. 2. Dependence of the lattice parameter with height. Black line is for  $\alpha \neq 0$  (non-rigid substrate) and grey line is for  $\alpha = 0$  (rigid substrate).

place throughout the recovering of the lattice parameter at its value without strain. We assume that the film relaxes toward its lattice constant ( $a_f$ ) at the top of the island ( $\theta_f$ ) [8,10,11], while the substrate relaxes towards ( $a_s$ ) at ( $\theta_s$ ) following a sigmoidal function

$$a(\theta) = A + B / (1 + C \exp(-\theta / (\theta_f + \theta_s) \ln D)). \quad (1)$$

Fig. 2 shows this dependence, where the constants  $A$ ,  $B$ ,  $C$  and  $D$  are obtained by imposing the conditions: (i)  $a(-\theta_s) = a_s$ ; (ii)  $a(\theta_f) = a_f$ ; (iii)  $a(\theta) \rightarrow a_f(1 + \chi)$  when  $\theta \rightarrow \infty$  and (iv)  $a(\theta) \rightarrow a_s(1 - \chi)$  when  $\theta \rightarrow -\infty$ . For this study, we take  $\chi = 0.001$ .

Attending to the energy balance, we will describe the three terms involved within the elastic continuum theory framework [12]. In this scheme, the isotropic surface energy is considered by assuming a small-slope picture for the surface (see Ref. [2]). As it is well established, the isotropic elastic free energy density for a thin layer volume is expressed in terms of the Lamé constants ( $\lambda$  and  $\mu$ ) of the given layer and the elastic strain tensor  $u_{ij}$  which is defined by means of the displacement vector  $u_h$ . In particular, for the film material, the displacement vector is written as  $u_h = r'_h - r_h = (x\delta_f, y\delta_f, \theta(x, y))$ , where  $\delta_f = a(\theta)/a_f - 1$  and  $a(\theta)$  is the lattice parameter at the height  $\theta$  (see Eq. (1)). Then, its elastic free energy density will be

$$\begin{aligned} f_f = & 2(\lambda_f + \mu_f)(\delta_f^2 + \delta_f^3 + \delta_f^4/4) \\ & + (\lambda_f + \mu_f)(\delta_f + \delta_f^2/2)\phi^2 \\ & + (\lambda_f + 2\mu_f)\phi^4/8. \end{aligned} \quad (2)$$

Here,  $\phi = ((\partial_x \theta)^2 + (\partial_y \theta)^2)^{1/2}$  is a mean slope and it can be considered as a scalar order parameter,

(see Ref. [2]). For the case of the substrate material, the displacement vector is written as  $u_h = r'_h - r_h = (x\delta_s, y\delta_s, k)$  where  $\delta_s = a(\theta)/a_s - 1$  and  $k$  is a constant. Contrary to the film displacement vector, the third coordinate can be considered constant, because the roughness induced in the substrate region is nearly negligible if it is compared with the induced one in the film. Then, the elastic strain energy density of the substrate will be

$$f_s = 2(\lambda_s + \mu_s)(\delta_s^2 + \delta_s^3 + \delta_s^4/4). \quad (3)$$

We define a total free energy surface density in a mean-field description as (see Ref. [2])

$$f_{\text{tot}} = \gamma(1 + \phi^2/2) + \int_0^{\theta_f} f_f d\theta + \int_{-\theta_s}^0 f_s d\theta \quad (4)$$

which is rewritten in terms of the slope as

$$f_{\text{tot}} = q(\theta) + r(\theta)\phi^2 + s(\theta)\phi^4. \quad (5)$$

For  $\alpha = 0$ ,  $f_s = 0$  and the rigid substrate approximation is recovered. In the above equation,  $s(\theta)$  is always a positive function of  $\theta$ , while  $r(\theta)$  can be positive or negative in the investigated region of small slopes (note that  $\delta_f < 0$  when  $\theta < \theta_f$ ). For  $\phi = 0$ ,  $f_{\text{tot}}$  represents the total free energy surface density for a flat stressed film.

On the other hand, as the height  $\theta$  is expressed in terms of the number of monolayers ( $n$ ), our results will be shown as a function of  $n$ ,  $n_f$  (total coverage) and  $n_s$  (number of substrate strained monolayers). Also, to simplify notation,  $f_{\text{tot}}$  will be referred hereafter as the free energy density. Throughout the paper, the values of Lamé constants and surface tension parameter for the investigated system are taken from Ref. [13].

### 3. Results and discussion

In order to investigate the 2D–3D growth transition in typical S–K growth mode, we analyze the stability regions in terms of the slope  $\phi$ , our order parameter. For this, the equilibrium states will be obtained by minimizing the free energy density with respect to  $\phi$ . From Eq. (5), we obtain their extreme points; i.e.,

$$\phi = 0; \quad \phi = \pm(-r(n)/2s(n))^{1/2} = \phi_{\pm}. \quad (6)$$

In Fig. 3, the free energy density is plotted as a function of the slope and the coverage. Two well defined stability regimes are shown. One of them is defined for

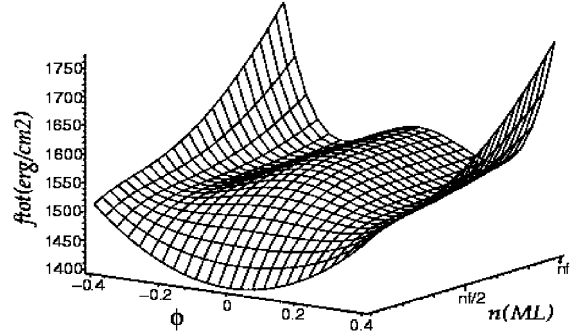


Fig. 3. Free energy density as a function of the slope and the coverage for InAs/GaAs (001) SAQDs.

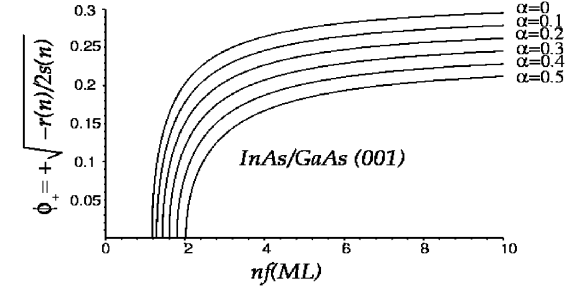


Fig. 4. Slope versus coverage for different values of  $\alpha$  for InAs/GaAs (001) SAQDs.

small values of  $n$ , where  $f_{\text{tot}}$  has only one minimum at  $\phi = 0$ , which means that the stable configuration of the system is plane (2D growth mode). The other regime is defined for increasing values of  $n$ , where  $f_{\text{tot}}$  has a maximum at  $\phi = 0$  and two symmetric minima at  $\phi_{\pm}$ . This means that a new configuration with slope different from zero becomes stable, which corresponds to the islands formation (3D growth mode). Therefore, the 2D–3D growth transition is characterized by the first value of  $n$  at which the minimum slope is non-zero. This will allow us to define the transition thickness of the system.

Fig. 4 shows  $\phi_{\pm}$  (Eq. (6)) as a function of  $n$  and for several values of  $\alpha$ . From the crossing points, values ranging between 1.18 and 2.02 ML are estimated for the transition thickness. The value of 1.18 ML is obtained for  $\alpha = 0$ , which corresponds with the case of the rigid substrate approximation and it is similar to the obtained in our previous works [10,11]. For

$\alpha \neq 0$ , the transition thickness values are in better agreement with the experimental ones reported in the literature (1.5–1.8 ML) [14]. Besides, the best agreement with the RHEED experiments is obtained for values of  $\alpha$  ranging between 0.2 and 0.4. This means that the percentage of substrate thickness undertaken by strain reaches 20–40% of the total coverage. From these results, it can be claimed that the non-rigid substrate approximation applied herein is a more realistic approach in the study of the relaxation phenomena of heteroepitaxial growth.

Finally, reasons should be given to justify the sigmoidal-type function for the dependence of the lattice parameter with the height. As in the heteroepitaxial growth, the materials involved in the growth process are different; one expects an abrupt change in their physical properties, just at the interface between two materials. In particular, the lattice parameter will suffer an abrupt change between the value corresponding to the substrate material ( $a_s$ ) and that corresponding to the deposited film ( $a_f$ ) following a Heaviside function. However, within a coherent growth picture, typical in pseudomorphological structures like that investigated herein, the lattice constant of the film is readapted to the substrate lattice parameter near the interface. After, it recovers its value in following phases of the growth process. Consequently, at the interface there will be a smooth change of the lattice parameter and not an abrupt step. Thus, by imposing the coherence criteria, it seems reasonable to take a sigmoidal-type function to describe the dependence of the lattice parameter with the height. Physical properties such as the Fermi level, conduction and valence bands at the interface of two different semiconductors have a sigmoidal behavior. On the other hand, Spencer [15] describes the physical properties change at the interface of two semiconductors in terms of a family of functions with sigmoidal aspect.

#### 4. Conclusion

We have determined the transition thickness of arbitrarily shaped InAs/GaAs (001) SAQDs in the

framework of the continuum elastic theory. Coherence growth criteria have been assumed to investigate the lattice parameter change at the interface. For its dependence with height, a sigmoidal-like function has been taken. The approach applied herein, the non-rigid substrate approximation yields transition thicknesses which are in good agreement with the experimental ones. From these results, it can be concluded that the substrate is affected by the relaxation phenomenon in the S–K growth mode.

#### References

- [1] K. Barnham, D. Vvedensky (Eds.), *Low-Dimensional Semiconductor Structures: Fundamentals and Devices Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001, p. 9.
- [2] R.A. Budiman, H.E. Ruda, *J. Appl. Phys.* 88 (2000) 4586.
- [3] P. Sutter, M. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 4637.
- [4] R.M. Tromp, F.M. Ross, M.C. Reuter, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 4641.
- [5] J. Tersoff, F.K. LeGoues, *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994) 3570.
- [6] A.L. Barabási, *Appl. Phys. Lett.* 70 (1997) 2565.
- [7] P. Müller, R. Kern, *Surf. Sci.* 457 (2000) 229.
- [8] A. Sasaki, E.R. Weber, Z. Liliental-Weber, S. Rivimov, J. Washburn, Y. Nabetani, *Thin Solid Films* 367 (2000) 277.
- [9] B.J. Spencer, J. Tersoff, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 4858.
- [10] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, in: <http://www.cmp-cientifica.com> → TNT2001 → poster PB-34.
- [11] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, in: *Proceedings of the Joint COST Action P5 Workgroup Meeting on Individual and Assembled Nanoparticles and Quantum Dots*, Leuven, 25–27 April, 2002.
- [12] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 3rd (revised) edn., Pergamon Press, 1986, p. 9.
- [13] Landlot-Börstein, in: O. Madelung (Ed.), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1982, p. 63, 105, 299, 235.
- [14] A. Sasaki, *J. Crystal Growth* 160 (1996) 27.
- [15] B.J. Spencer, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 2011.



ELSEVIER

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

Journal of Crystal Growth 253 (2003) 190–197

JOURNAL OF  
**CRYSTAL  
GROWTH**

[www.elsevier.com/locate/jcrysgro](http://www.elsevier.com/locate/jcrysgro)

# Stranski–Krastanov growth mode in Ge/Si(0 0 1) self-assembled quantum dots

S.N. Santalla\*, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz

*Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid. Av. de la Universidad, 30, 28911 Leganés, Madrid, Spain*

Received 20 January 2003; accepted 8 March 2003

Communicated by D.W. Shaw

## Abstract

Within the framework of the continuum elasticity theory, we have characterized the Stranski–Krastanov mode in Ge/Si(0 0 1) self-assembled quantum dots by means of the transition thickness and the accumulated stress. The systems under investigation are pseudomorphic structures with a coherent behavior at the substrate/film interface. For the dependence of the lattice parameter with the height, a sigmoidal-type function with appropriate constraints is considered. To evaluate the transition thickness, a minimization of the total free energy density with respect to the slope is made. Two different regimes for the accumulated stress are obtained in the range of investigated coverage. These regimes are directly related to the two stages of the Stranski–Krastanov mode, characterized by a second-order transition where the slope is the order parameter. The non-rigid substrate approximation is applied in our systems yielding transition thickness and compressive stress values which are in good agreement with the experimental ones. From these results, it can be deduced that the substrate is affected by relaxation phenomenon in the Stranski–Krastanov mode. In  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(0\ 0\ 1)$  heterostructures, the transition thickness is inversely proportional to the Ge composition and the compressive stresses are smaller for decreasing misfit strain.

© 2003 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

*PACS:* 62.20.Dc; 81.15.Hi; 85.30.Vw

*Keywords:* A1. Nanostructures; A1. Growth models; A1. Stresses; A3. Stranski–Krastanov growth; B1. Germanium silicon alloys

## 1. Introduction

Since the last years, the growth of Ge on Si substrates is attracting considerable interest because of their importance for the fabrication of optoelectronic devices (based, e.g., on strained-

layer superlattices or uniform quantum dot arrays) as well as of Si-based high-speed transistors in GeSi alloys. On Si(0 0 1) film growth proceeds by Stranski–Krastanov (S–K) mode, i.e., 3D islands nucleate on top of the wetting layer. Besides, these Ge 3D islands grow coherent on the substrate, i.e., dislocation free up to lateral dimensions as large as 100 nm [1,2]. However, the suddenly switching from 2D to 3D growth modes in the S–K systems is still a subject of debate. According to the

\*Corresponding author. Tel.: +34-91-624-9184; fax: +34-91-624-8749.

E-mail address: [ssantall@fis.uc3m.es](mailto:ssantall@fis.uc3m.es) (S.N. Santalla).

thermodynamic models, the driving force for 3D islanding is the reduction of the elastic strain energy which compensates the additional cost of free surface energy [3,4]. In fact, the 3D islands partially relax the misfit strain because upper layers are free to adjust their interatomic distance to the respective bulk values. In addition to the thermodynamic explanation, there is evidence for kinetic processes to be involved in the 3D islanding mechanism. Temperature-dependent diffusion processes as well as the presence of Ehrlich–Schwoebel barriers, which are enhanced by the strain field can promote the nucleation and growth of the 3D islands [5,6].

Focusing on the thermodynamic point of view, many theories based on equilibrium considerations of the balance of strain and surface energies have been developed. Some of them use atomistic calculations for the stress distribution inside the as-grown film [7], while others use continuum description of the elastic strain energy [4,8,9]. Sasaki et al. [9] have derived an analytical equation for the transition thickness in terms of an energy balance between strain energy and surface energy. They considered that only the film is strained and obtained a value of 3.1 ML for the Ge/Si system. This transition thickness is smaller than that obtained in RHEED experiments [10] or from the film force measurements [11]. On the other hand, as changes of stress are directly related to the relief of misfit strain, quantitative information on the reduction of the elastic energy by 3D islanding is obtained. Therefore, to characterize the S–K mode, it seems necessary to analyze the 2D–3D phase transition in terms of the intrinsic stress and the transition thickness.

The aim of this paper is to evaluate the transition thickness and the accumulated stress in arbitrarily shaped Ge/Si(001) self-assembled quantum dots (SAQDs) within the framework of the continuum elasticity theory. The “non-rigid substrate approximation”, where the relaxation process occurs in both substrate and film materials, is taken into account. This approach was successfully applied in InAs/GaAs(001) SAQDs [12]. Also, we estimate the transition thickness dependence on Ge composition in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  heterostructures. The paper is organized

as follows. In Section 2, a brief description of the theoretical model is made. The implementation of the model and discussion of the results are developed in Section 3. Finally, the main conclusions are given in Section 4.

## 2. Theoretical model

The base of the non-rigid substrate approximation is to consider that film and substrate materials are deformed by the misfit strain, so that the elastic energy is stored within both of them. Fig. 1 shows the surface description, where  $(x, y)$  represent the coordinates of the planar film–substrate interface and the function  $\theta(x, y)$  is the deposited film thickness. Johnson and Freund [13] considered that the relaxation process takes place throughout the film and is not limited to the island volume. Besides, we assume that the film relaxes toward its bulk lattice constant ( $a_f$ ) at the top of the island ( $\theta_f$ ) [9,12], while the substrate relaxes toward ( $a_s$ ) at ( $-\theta_s$ ) [12]. We also consider that only a fraction of the substrate thickness participates in the strain relaxation; i.e.,  $\theta_s = \alpha\theta_f$  with  $0 \leq \alpha < 1$ . Then, the fraction of the substrate thickness is proportional to the total coverage. To describe the relaxation mechanism, we propose a sigmoidal law which defines the lattice dependence with the thickness, i.e.

$$a(\theta) = A + \frac{B}{1 + C \exp(-(\theta/\theta_f + \theta_s) \ln D)}. \quad (1)$$

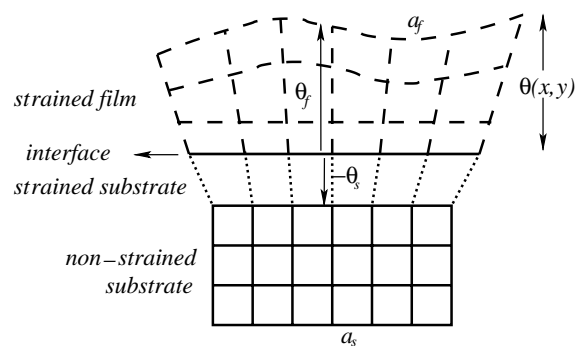


Fig. 1. Schematic representation of S–K growth pattern in the non-rigid substrate scheme.  $\theta_f$  is the top of the island and  $\theta_s$  is the strained substrate thickness.



In our formulation, the constants  $A$ ,  $B$ ,  $C$  and  $D$  are obtained by imposing the conditions: (i)  $a(-\theta_s) = a_s$ ; (ii)  $a(\theta_f) = a_f$ ; (iii)  $a(\theta) \rightarrow a_f(1 + \chi)$  when  $\theta \rightarrow \infty$  and (iv)  $a(\theta) \rightarrow a_s(1 - \chi)$  when  $\theta \rightarrow -\infty$ . Upon these criteria, the parameter  $\chi$  must satisfy the constraint  $\chi > \varepsilon_0/(\varepsilon_0 + 2)$ , where  $\varepsilon_0$  is the misfit strain defined by  $(a_s - a_f)/a_f$ . For this study, we take  $\chi = 0.001$ , value that yields a relative error of 0.1% for the bulk lattice parameters. As it is expected, when the film and substrate relax, at a distance sufficiently far from the interface, their respective lattice constants recover their bulk values. Therefore, the obtained error of 0.1% is small enough to consider that the parameter  $\chi$  fits properly in the formulation. Notice that the assumption of a sigmoidal law for the lattice parameter entails a sigmoidal dependence for the misfit strain. Kukta and Freund [14] assumed a similar regularization of the interface, where there is a narrow transition region through which the mismatch strain changes continuously.

To perform our model, we restrict the analysis to the interplay between the strain elastic and surface energies. Other relaxation mechanisms such as the misfit dislocations are neglected. Attending to the energy balance, we will describe all the terms within the elasticity continuum theory [15]. In this framework, the isotropic elastic free energy density for a thin layer volume is expressed as  $f_e = (\lambda/2)u_{ii}^2 + \mu u_{ij}^2$ .  $\lambda$  and  $\mu$  are the Lamé constants of the given layer and  $u_{ij}$  is the elastic strain tensor which is defined in terms of the displacement vector  $u_i$ . In particular, for the film material, the displacement vector is written as  $u_{i(f)} = r'_{i(f)} - r_{i(f)} = (x\delta_f, y\delta_f, \theta(x, y))$  where  $\delta_f = a(\theta)/a_f - 1$ . Then, its elastic free energy density is [12]

$$f_f = 2(\lambda_f + \mu_f)(\delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4}\delta_f^4) + (\lambda_f + \mu_f)(\delta_f + \frac{1}{2}\delta_f^2)\phi^2 + \frac{1}{8}(\lambda_f + 2\mu_f)\phi^4. \quad (2)$$

Here,  $\phi = \sqrt{(\partial_x \theta)^2 + (\partial_y \theta)^2}$  is a mean slope and it is considered as a scalar order parameter (see Ref. [4]). To describe the strain effect in the substrate, let us assume that the deformation in the growth direction is uniform through the substrate

region. Therefore, the displacement vector is defined as  $u_{i(s)} = r'_{i(s)} - r_{i(s)} = (x\delta_s, y\delta_s, k)$  where  $\delta_s = a(\theta)/a_s - 1$  and  $k$  is a constant. Then, the elastic strain energy density of the substrate is [12]

$$f_s = 2(\lambda_s + \mu_s)(\delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4}\delta_s^4). \quad (3)$$

On the other hand, the isotropic surface energy is written as  $F_{\text{surf}} = \gamma \int dA$ , where  $\gamma$  is the constant surface tension and  $dA$  is the differential surface; i.e.,  $dA = \sqrt{1 + (\nabla \theta)^2} dx dy$ . By assuming a small-slope picture, the surface energy is given by

$$F_{\text{surf}} = \gamma \int (1 + \frac{1}{2}\phi^2) dx dy. \quad (4)$$

Accordingly, we define a total free energy surface density in a mean-field description as

$$f_{\text{tot}} = \gamma \left(1 + \frac{1}{2}\phi^2\right) + \int_0^{\theta_f} f_f d\theta + \int_{-\theta_s}^0 f_s d\theta, \quad (5)$$

which is rewritten in terms of the slope as

$$f_{\text{tot}} = q(\theta) + r(\theta)\phi^2 + s(\theta)\phi^4. \quad (6)$$

In the above equation

$$q(\theta) = \gamma + \int_0^{\theta_f} 2(\lambda_f + \mu_f) \left( \delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4}\delta_f^4 \right) d\theta + \int_{-\theta_s}^0 2(\lambda_s + \mu_s) \left( \delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4}\delta_s^4 \right) d\theta, \quad (7)$$

$$r(\theta) = \frac{\gamma}{2} + \int_0^{\theta_f} (\lambda_f + \mu_f) \left( \delta_f + \frac{1}{2}\delta_f^2 \right) d\theta, \quad (8)$$

and

$$s(\theta) = \int_0^{\theta_f} \frac{1}{8}(\lambda_f + 2\mu_f) d\theta. \quad (9)$$

For  $\alpha = 0$ ,  $f_s = 0$  and all the elastic energy is stored within the film, then the rigid substrate approximation is recovered. As the Lamé constants are positive,  $s(\theta)$  is always a positive function of  $\theta$ , while  $r(\theta)$  can be positive or negative in the investigated region of small slopes. For  $\phi = 0$ ,  $f_{\text{tot}}$  represents the total free energy surface density for a flat stressed film.

Respect to the stress distribution, it will be analyzed in terms of the accumulated stress whose slope yields the incremental stress. The accumulated stress is also referred in the literature as film force, strain-thickness or integrated stress [11,16].

According to the condition of coherent growth, we define the accumulated stress through the biaxial components of the stress tensor for the substrate and film materials; i.e.,

$$\langle \sigma_{xx} \rangle = \int_{-\theta_s}^0 \sigma_{xx(s)} d\theta + \int_0^{\theta_f} \sigma_{xx(f)} d\theta. \quad (10)$$

As it is known from the elasticity continuum theory, the stress tensor is related to the strain tensor by means of the Lamé and bulk modulus constants. With the above expressions for the displacement vectors, we have for the substrate material

$$\sigma_{xx(s)} = \sigma_{yy(s)} = (\mu_s + \lambda_s)(2\delta_s + \delta_s^2) \quad (11)$$

and for the film

$$\sigma_{xx(f)} = (\mu_f + \lambda_f)(2\delta_f + \delta_f^2) + \frac{1}{2}\lambda_f\phi^2 + \mu_f\theta_x^2 \quad (12)$$

and

$$\sigma_{yy(f)} = (\mu_f + \lambda_f)(2\delta_f + \delta_f^2) + \frac{1}{2}\lambda_f\phi^2 + \mu_f\theta_y^2. \quad (13)$$

Here,  $\phi$  is the order parameter [4] and  $\theta_x$  ( $\theta_y$ ) is the slope along the  $x$  ( $y$ ) direction. Obviously, for  $\alpha = 0$ ,  $\sigma_{xx(s)} = \sigma_{yy(s)} = 0$  and the rigid substrate approximation is recovered. Notice that Eq. (10) can be understood as a modified Floro's concept of the stress thickness. As in Ref. [16], the stress components are spatially dependent functions of the thickness. To account on its effect over all the QDs, we estimate that it is necessary to evaluate the expected value of the components throughout the film coverage.

Finally, as the height  $\theta$  is expressed in terms of the number of monolayers ( $n$ ) and the value of a monolayer, our results will be shown as a function of  $n$ ,  $n_f$  (total coverage),  $n_s$  (monolayers of strained substrate) and  $n_t$  (transition thickness). Also, to simplify notation,  $f_{\text{tot}}$  will be referred hereafter as free energy density. Throughout the paper, the values of Lamé constants and surface tension parameter are taken from Ref. [17]. In particular, for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  alloy we have considered linear interpolation of lattice parameters and elastic constants  $C_{11}$  and  $C_{12}$  of Ge and Si.

### 3. Results and discussion

In order to investigate the 2D–3D growth transition in typical S–K mode, we determine the transition thickness and the accumulated stress in Ge/Si(001) SAQDs. While the “transition thickness” is the thickness at which the 2D–3D growth transition takes place, changes of stress yield information about the reduction of the elastic energy by 3D islanding. To evaluate the transition thickness, we analyze the stability regions of the free energy density in terms of the slope  $\phi$ , the order parameter. The equilibrium states will be obtained by minimizing the free energy density with respect to  $\phi$ . From Eq. (6), we obtain their extrema points, i.e.,

$$\phi = 0, \quad \phi = \pm \sqrt{-\frac{r(n)}{2s(n)}} = \phi_{\pm}. \quad (14)$$

Following the Landau theory [18], the term  $r(n)$  must vanish at the transition. Attending to the sign change of  $r(n)$ , two well-defined stability regimes are obtained. The first regime is characterized by small values of the film coverages, i.e.,  $n < n_t$ . In this region,  $r(n) > 0$  and  $f_{\text{tot}}$  has only one real minimum located at  $\phi = 0$ . We associate this region with a stable 2D plane configuration (2D growth mode). On the other hand, for  $n > n_t$ ,  $r(n) < 0$  and  $f_{\text{tot}}$  has a maximum at  $\phi = 0$  and two symmetric minima at  $\phi_{\pm}$ . This regime can be associated with a new configuration whose slopes are different from zero, that corresponds to the formation of 3D islands above the 2D structure. Therefore, we estimate that the 2D–3D growth transition is characterized by the first value of  $n$  at which the slope yielding minimum value of  $f_{\text{tot}}$  is non-zero. This allows us to define the transition thickness of the system. We illustrate the above discussion in Fig. 2 by means of the  $\phi$ – $n$  phase diagram. From the Landau theory [18], the S–K mode follows a second-order transition. In fact, if we return to the expression of the free energy density (see Eq. (6)), we observe that  $f_{\text{tot}}$  is an even function of the order parameter. In our formulation, the order parameter vanishes at the transition point. For coverages higher than this value, the plane configuration with  $\phi = 0$  is unstable being the

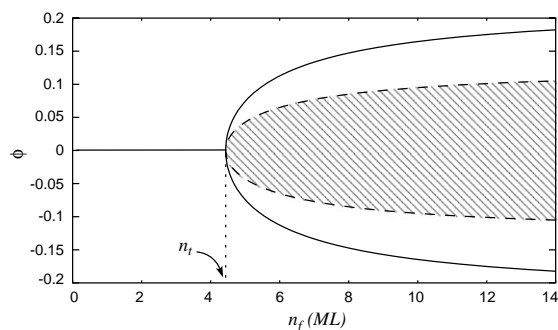


Fig. 2.  $\phi$ – $n$  phase diagram of the S–K pattern growth in Ge/Si(001) SAQDs. The values which make minimum  $f_{\text{tot}}$  and make null the second derivative of  $f_{\text{tot}}$  are shown with continuous and dotted lines, respectively. The shaded area represents the region where the second derivative of  $f_{\text{tot}}$  is negative.

second derivative of  $f_{\text{tot}}$  negative. The onset of the system is to get undulations with different slopes until to rise a slope which minimizes the free energy density. This could mean that the stable configuration is characterized by a nearly uniform profile of 3D islands being the second derivative of  $f_{\text{tot}}$  positive. Notice that in our model, the fluctuations of the order parameter are neglected. Therefore, changes in the order parameter are related to the change in the profile of the islands. Qualitatively, our model predicts a maximum slope value of 0.22, which is roughly similar to the experimental value of 0.19 obtained in Ge/Si(001) SAQDs grown by MBE at 430°C [19]. However, for QDs grown by electron-beam deposition at 600°C, the slope islands can reach values as high as 0.49 [20]. Such a high slope is correlated with the Schwoebel barriers [11], which are not taken into account in our model. Also, the curve of maximum slope indicates that the islands formation is auto-limited for any given film coverage. It is known that the strain relaxation and surface energies, which constitute the main driving forces in the S–K growth, are temperature insensitive, while the islands size and density are strongly dependent on the growth temperature and deposition rate [21]. Therefore, we can assume that the islands morphology is kinetically controlled. Then, the effect of temperature would favor the islands morphology to develop toward the

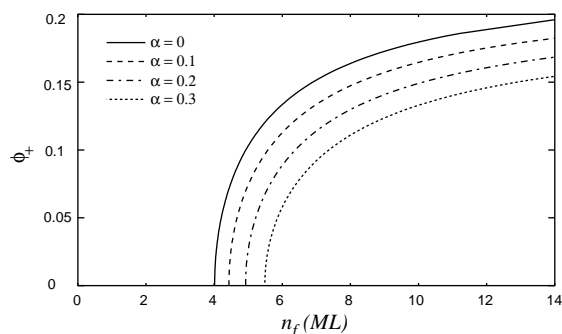


Fig. 3. Slope versus coverage for several values of  $\alpha$  in Ge/Si(001) SAQDs.

thermodynamically stable configuration. Upon this criterium, for any coverage greater than the transition thickness, islands with different sizes can coexist with their 2D plane wetting layer.

Fig. 3 shows  $\phi_+$  (Eq. (14)) for Ge/Si(001) SAQDs as a function of  $n$  for several values of  $\alpha$ . From the crossing points, values ranging between 4.01 and 5.49 ML are estimated for the transition thickness. The value of 4.01 ML is obtained for  $\alpha = 0$ , which corresponds with the rigid substrate approximation. For  $\alpha = 0.1$ , the transition thickness of 4.43 ML is in good agreement with that obtained in RHEED experiments [10]. However, higher  $\alpha$  yield transition thicknesses farther from the experimental ones. Therefore, within the framework of our model, this could be interpreted that the fraction of substrate undertaken by strain reaches nearly 10% of the total coverage. By comparing with our previous results, we find that the fraction of strained substrate in Ge/Si is smaller than that obtained in InAs/GaAs SAQDs [12]. This could be explained in terms of a different value of misfit. For systems with a smaller misfit (e.g., 4% for Ge/Si in contrast to 7% for InAs/GaAs), it is possible that regions close to the interface are less affected by strain. Therefore, the fraction of strained substrate in Ge/Si system would be smaller than in InAs/GaAs system.

The accumulated stress for  $\alpha = 0.1$  is shown in Fig. 4. Two different stress regimes characterized by different slopes are obtained. The first extends from the beginning of the film growth up to coverages of approximately 4.4 ML with a slope of  $-3.06$  GPa. This value belongs to the interval of



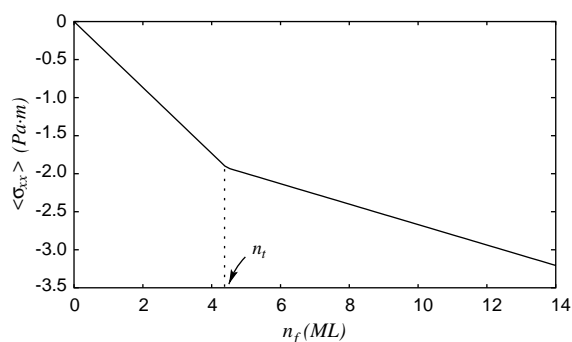


Fig. 4. Accumulated stress as a function of the coverage for  $\alpha = 0.1$  and  $\theta_x = \theta_y = \phi/\sqrt{2}$  in Ge/Si(001) SAQDs.

compressive stresses obtained from film force measurements in the range of temperatures 820–970 K [11]. This regime is attributed to the 2D growth in the S–K mode. For increasing coverages, a second regime characterized by a slope of  $-0.95$  GPa appears. This reduction of incremental stress which induces a strain relief can be associated with the 3D islanding in the S–K mode. The slope value is similar to that obtained in Ref. [11]. The accumulated stresses for  $\alpha = 0, 0.2$  and  $0.3$  are also investigated. All of them show a similar behavior as for  $\alpha = 0.1$ , but the slope values in the two regimes are farther to the experimental incremental stresses [11]. From the above results, it can be deduced two features: (a) the two stability regions of the free energy density are directly related to the two stress regimes and consequently, they define the two stages of S–K mode; (b) the non-rigid substrate approximation seems to be a realistic approach to study the relaxation phenomenon of heteroepitaxial growth.

Fig. 5 shows the transition thickness dependence on the Ge composition for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  heterostructures. This dependence follows a law like  $\sim 1/x$ . When the lattice misfit or the composition of Ge is smaller, the 2D growth mode appears mainly in the figure. As the lattice misfit increases, the 2D–3D phase transition appears before with a smaller transition thickness. From these results, we can argue that the islands size would be composition-dependent. Since two different alloys with the same coverage would have different values for the wetting layer, consequently the islands size would be different. On the other hand, we find that the

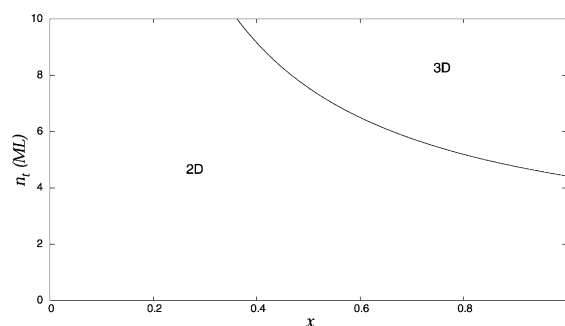


Fig. 5. Transition thickness as a function of the composition  $x$  for the  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  heterostructure.

accumulated stress has a similar behavior with the Ge composition. It is characterized by two different stress regimes. The first regime defined by a higher compressive stress is associated with the 2D growth, while a reduction of the slope in the second regime is attributed to the 3D islanding. For smaller Ge composition, smaller compressive stresses are obtained as a consequence of the misfit reduction between film and substrate materials. For instance, in the non-rigid substrate approximation ( $\alpha = 0.1$ ), slopes of  $-1.83$  and  $-0.56$  GPa are obtained in  $\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}/\text{Si}(001)$  heterostructure for the first and second regimes, respectively. The high values of compressive stress could induce the Ge atoms to overcome diffusion barriers in the Ge/Si system better than in the  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  heterostructure. Thus, the atomic exchange can be strongly accelerated in the compressed Ge layers, where the stored elastic energy should favor atomic mobility [22].

Finally, some arguments should be given to justify the sigmoidal-type function for the dependence of the lattice parameter with the height. These arguments are mainly based on the regularization of the interface proposed by Kukta and Freund [14]. As in the heteroepitaxial growth, the materials involved are different; one expects an abrupt change in their lattice parameters, just at the interface between two materials. However, for coherent growth, the lattice constant of the film is readapted to the substrate lattice parameter near the interface such as it recovers its equilibrium value at a distance sufficiently far from the interface. Consequently, at the interface there will

be a smooth change of the lattice parameter leading to a continuous change in the misfit strain. Notice that a sigmoidal dependence represents a smooth regularization of the step transition for the misfit strain. Kukta and Freund [14] assumed other functional dependence for the mismatch strain, but with similar characteristics to the sigmoidal function in the transition region across the interface. This region can be viewed as an interface phase which has properties different from those of the bulk phases of the film and substrate. The authors adopted the regularized interface scheme in order to determine the island morphology as a free-boundary problem, where the shape is not restricted in any way. Notice that in our model, the QDs morphology is arbitrary; therefore, the regularization of the interface seems an appropriate method. On the other hand, Spencer [23] claimed that the macroscopic results would be independent of the choice of the functional form of the transition region and the parameter which defines the size of this region. Indeed, the author proposed a wide range of possible boundary-layer models with the constraint that the functional forms verify the correct properties above and below the interface. In our case, the sigmoidal law reproduces accurately the misfit strain far away the interface. Furthermore, experimental and computed data of strain relaxation show a sigmoidal-type dependence with the height in semiconductor heteroepitaxial systems [24]. Therefore, our choice for functional form seems adequate to account for the dependence of the lattice parameter with the thickness.

#### 4. Conclusion

We have analyzed the S–K phase transition in arbitrarily shaped Ge/Si(001) SAQDs. For this, we have determined the transition thickness and the accumulated stress in the framework of the continuum elasticity theory. Coherency growth criteria are assumed to investigate the lattice parameter change at the interface. For its dependence with the height, a sigmoidal-like function is taken. The assumption of this functional form is based on the regularized interface scheme and

experimental data of strain relaxation. Two different regimes for the free energy density as well as for the stress distribution are obtained. These regimes are directly related to the two stages of the S–K growth mode. Furthermore, the incremental stress is higher in the wetting layer than in the 3D islands. Attending to the 2D rotational symmetry of the free energy density, the 2D–3D transition in S–K mode is a second-order transition, where the slope  $\phi$  is the order parameter. The non-rigid substrate approximation is applied in our systems yielding successful results for the transition thickness and compressive stress values. Then, the substrate is affected by the relaxation phenomenon in the S–K mode. Indeed, for systems with smaller misfit, the fraction of strained substrate seems to be lesser than for systems with higher misfit. In  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  heterostructures, the transition thickness is Ge composition dependent and the compressive stresses are smaller for decreasing misfit strain. Finally, the regularization of the interface with a sigmoidal law will serve to analyze the morphology of semiconductor SAQDs in future.

#### References

- [1] Y. Kataoka, H. Ueba, C. Tatsuyama, *J. Appl. Phys.* 63 (1988) 749.
- [2] M. Hammar, F.K. LeGoues, J. Tersoff, M.C. Reuter, R.M. Tromp, *Surf. Sci.* 349 (1996) 129.
- [3] J. Tersoff, R.M. Tromp, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 2782; N. Moll, A. Kley, E. Pehlke, M. Scheffler, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 8844.
- [4] R.A. Budiman, H.E. Ruda, *J. Appl. Phys.* 88 (2000) 4586.
- [5] Y.-W. Mo, D.E. Savage, B.S. Swartzentruber, M.G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 1020.
- [6] G. Ehrlich, F.G. Hudda, *J. Chem. Phys.* 44 (1966) 1039; R.L. Schwoebel, E.J. Shipsey, *J. Appl. Phys.* 37 (1966) 3682.
- [7] A.L. Barabási, *Appl. Phys. Lett.* 70 (1997) 2565.
- [8] P. Müller, R. Kern, *Surf. Sci.* 457 (2000) 229.
- [9] A. Sasaki, E.R. Weber, Z. Liliental-Weber, S. Rivimov, J. Washburn, Y. Nabetani, *Thin Solid Films* 367 (2000) 277.
- [10] K. Sakamoto, T. Sakamoto, S. Nagao, G. Hashiguchi, K. Kuniyoshi, Y. Bando, *Jpn. J. Appl. Phys.* 26 (1987) 666.
- [11] G. Wedler, J. Walz, T. Hesjedal, E. Chilla, R. Koch, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2382.
- [12] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, *Physica E* 17C (2003) 480.

- [13] H.T. Johnson, L.B. Freund, *J. Appl. Phys.* 81 (1997) 6081.
- [14] R.V. Kukta, L.B. Freund, *J. Mech. Phys. Solids* 45 (1997) 1835.
- [15] L.D. Landau, E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, Vol. 7, 3rd (revised) Edition, Pergamon Press, Oxford, 1986, p. 9.
- [16] J.A. Floro, E. Chason, S.R. Lee, R.D. Twisten, R.Q. Hwang, L.B. Freund, *J. Electron. Mater.* 26 (1997) 969.
- [17] Landlot-Börstein, in: O. Madelung (Ed.), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1982, pp. 63, 105, 299, 235.
- [18] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique Statistique*, 3rd Edition, Tome V, Mir, Mosou, 1984, p. 494.
- [19] A.J. Steinfert, P.M.L.O. Scholte, A. Ettema, F. Tuinstra, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 2009.
- [20] G. Medeiros-Ribeiro, A.M. Bratkovski, T.I. Kamins, D.A.A. Ohlberg, R.S. Williams, *Science* 279 (1998) 353.
- [21] Y.Q. Wang, Z.L. Wang, J.J. Zheng, A.S. Brown, *Sol. Stat. Commun.* 122 (2002) 553.
- [22] F. Rosei, P. Raiteri, *Appl. Surf. Science* 195 (2002) 16.
- [23] B.J. Spencer, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 2011.
- [24] D. Maroudas, L.A. Zepeda-Ruiz, W.H. Weinberg, *Appl. Phys. Lett.* 73 (1998) 753.

# Substrate orientation effects on the Stranski–Krastanov growth mode

Silvia N Santalla, Clement Kanyinda-Malu and Rosa M de la Cruz

Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid, Avenida de la Universidad 30, 28911 Leganés (Madrid), Spain

E-mail: [silvia.santalla@uc3m.es](mailto:silvia.santalla@uc3m.es)

Received 25 September 2003

Published 12 February 2004

Online at [stacks.iop.org/Nano/15/S215](http://stacks.iop.org/Nano/15/S215) (DOI: 10.1088/0957-4484/15/4/018)

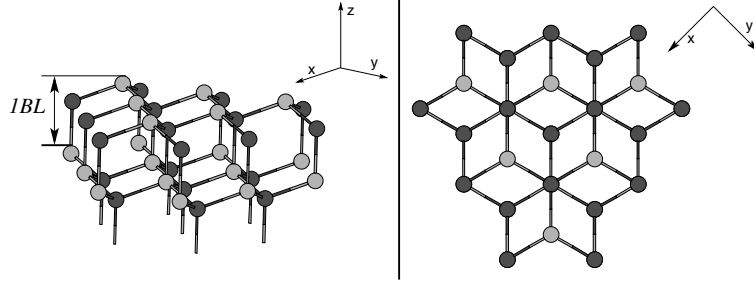
## Abstract

Within the framework of the continuum elasticity theory, we have investigated the substrate orientation effects on the Stranski–Krastanov growth mode in Ge/Si heterostructures. To do this, we have estimated the transition thickness and accumulated stress in Ge/Si(111) low-dimensional systems and we have compared these with the values obtained previously for Ge/Si(001) heterostructures. The systems under investigation are pseudomorphic structures with a coherent behaviour at the substrate/film interface. For the dependence of the lattice parameter on the height, a sigmoidal-type function with appropriate constraints is considered. To evaluate the transition thickness, a minimization of the total free energy density with respect to the slope is made. Two different regimes for the accumulated stress are obtained in the range of investigated coverage. These regimes are directly related to the two stages of the Stranski–Krastanov mode. Although increasing Miller indices in the substrate induces a delay in the 2D–3D phase transition with a greater wetting layer, the relief strain mechanisms seem similar to those of Ge/Si(001) heterostructures. The non-rigid-substrate approximation applied in the Ge/Si(111) system also yields successful results for the transition thickness and compressive stress values, the fraction of strained substrate being roughly double in Ge/Si(111). In  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  heterostructures, the transition thickness is inversely proportional to the Ge composition and the compressive stresses are smaller for decreasing misfit strain. This feature is similar to that of the  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  system.

## 1. Introduction

As is well established, one of the parameters which greatly influences the Stranski–Krastanov (SK) growth mode in low-dimensional strained heterostructures is the substrate orientation. A change in the Miller indices of the substrate allows us to control the strain relaxation in the heteroepitaxial systems, consequently inducing modifications in the onset of the SK growth mode, or even, in some cases, the inhibition of this mode. For instance, RHEED and STM measurements of InAs grown on GaAs(011) and GaAs(111) surfaces revealed that the growth is always two dimensional, i.e., layer by layer, and strain is relieved by the formation of misfit dislocations [1]. However, when InAs epitaxial layers were grown on high-

index substrates such as (113) and (115) GaAs, the PL spectra indicated a delay in the three-dimensional growth mode onset [2]. On the other hand, appropriate changes of substrate orientation induce different morphologies of the islands for the same epitaxial film. This phenomenon is observed by STM in Ge/Si(001) and Ge/Si(111) quantum dots (QDs) [3]. Although there are extensive experimental results on the substrate orientation effects, to our knowledge there are not enough theoretical studies. Therefore, the aim of this work is to investigate the islanding mechanism dependence on the substrate orientation for arbitrarily shaped Ge/Si QDs. The importance of these low-dimensional strained systems for fabrication of optoelectronic devices is reported elsewhere [4]. Figure 1 shows the schematic pattern of several bilayers (BL) of a single material with ‘diamond structure’ such as Ge in (111)



**Figure 1.** Schematic pattern of a generic material with a diamond structure on (111) orientation, where black and grey spheres represent next-neighbour atoms in the crystal. The left-hand panel shows the 3D view,  $z$  being the growth axis. The right-hand panel is the top view of the pattern.

orientation. In fact, for Ge, 1 BL is approximately 2.3 ML [3], since 1 ML = 0.141 nm.

Within the framework of the continuum elasticity theory, we have characterized the SK growth mode in terms of the transition thickness and the accumulated stress for increasing Miller indices of the substrate and we compare this with the SK growth pattern obtained previously in Ge/Si(001) heterostructures. Assuming a coherent behaviour at the substrate/film interface, we propose a sigmoidal law which defines the lattice dependence on the thickness to describe the relaxation mechanism. Also, the non-rigid-substrate approximation is taken into account, where film as well as substrate are strained. The validity of this approach was previously shown in the low-dimensional heterostructures investigated in [5, 6]. On the other hand, we estimate the transition thickness dependence on Ge composition in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  heterostructures. In this study, kinetical aspects of the SK growth mechanism are not considered. The paper is organized as follows. In section 2, a brief description of the theoretical model with special attention to the transformation relations for the stiffness tensor under a rotation is given. The implementation of the model and discussion of the results are developed in section 3. The main remarks and conclusion of this work will be given in section 4.

## 2. Theoretical model

The non-rigid-substrate approximation is based on the hypothesis that film and substrate materials are deformed by the misfit strain. Therefore, the elastic energy is stored within both of them.

The surface description for the SK pattern scheme is similar to that described in [5, 6]; so, we only recall here the major premises. In the model, we denote by  $\theta(x, y)$  the deposited film thickness, where  $(x, y)$  represent the coordinates of the planar film–substrate interface. Also, we consider that only a fraction of the substrate thickness ( $\theta_s$ ) participates in the strain relaxation; i.e.,  $\theta_s = \alpha\theta_f$ , with  $0 \leq \alpha < 1$ ,  $\theta_f$  being the top of the island.

To describe the relaxation mechanism, we propose a sigmoidal law which defines the lattice dependence on the thickness; i.e.,

$$a(\theta) = A + \frac{B}{1 + C \exp(-(\frac{\theta}{\theta_f + \theta_s} \ln D))}. \quad (1)$$

The constants  $A$ ,  $B$ ,  $C$  and  $D$  are obtained by imposing appropriate constraint conditions:

- (i)  $a(-\theta_s) = a_s(1 + \chi)$ ;
- (ii)  $a(\theta_f) = a_f(1 - \chi)$ ;
- (iii)  $a(\theta) \rightarrow a_f$  when  $\theta \rightarrow \infty$  and
- (iv)  $a(\theta) \rightarrow a_s$  when  $\theta \rightarrow -\infty$ .

For this study, we take  $\chi = 0.001$ .

From the continuum elasticity theory, the elastic free energy density for a thin volume layer is expressed as [7]

$$f_e = \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{ij} u_{kl} \quad (2)$$

where  $C_{ijkl}$  is the stiffness tensor and  $u_{ij}$  is the strain tensor defined in terms of derivatives of the displacement vector. For cubical crystals such as Ge and Si, the non-null unique stiffness constants are  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  and  $c_{44}$  [7]. The expressions for the film and substrate displacement vectors are taken from [6]. Then, the non-null strain tensor components for the film are

$$u_{f_{xx}} = \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 + \frac{1}{2} \theta_x^2 \quad (3a)$$

$$u_{f_{yy}} = \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 + \frac{1}{2} \theta_y^2 \quad (3b)$$

$$u_{f_{xy}} = u_{f_{yx}} = \frac{1}{2} \theta_x \theta_y \quad (3c)$$

and for the substrate

$$u_{s_{xx}} = u_{s_{yy}} = \delta_s + \frac{1}{2} \delta_s^2 \quad (4)$$

where  $\theta_x$  and  $\theta_y$  are the slopes along the  $x$  and  $y$  directions.  $\delta_f$  and  $\delta_s$  are the effective misfits, defined by  $\delta_f = a(\theta)/a_f - 1$  and  $\delta_s = a(\theta)/a_s - 1$ ,  $a_f$  and  $a_s$  being the film and substrate lattice constants without strain, respectively.

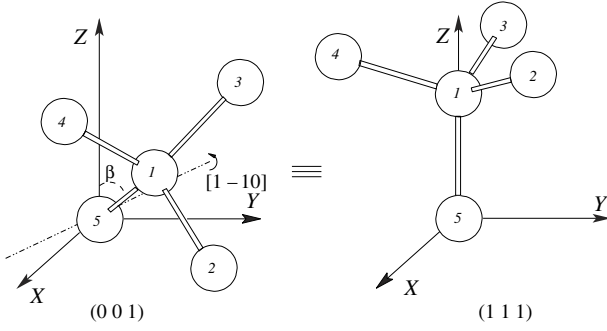
On the other hand,  $C_{ijkl}$  is a four-rank tensor and consequently, follows the transformation relation

$$C_{mnop} = a_{mi} a_{nj} a_{ok} a_{pl} C_{ijkl} \quad (5)$$

where  $a_{\alpha\beta}$  ( $\forall \alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ ) are the rotation matrix elements.

Therefore, the stiffness tensor for the (111) orientation is obtained from that of the (001) orientation in terms of the transformation law (equation (5)), the rotation matrix being

$$[a] = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix}. \quad (6)$$



**Figure 2.** Rotation from (001) to (111) through angle  $\beta$  around the axis  $[1\bar{1}0]$  in the diamond structure.

The above matrix represents a rotation of angle  $\beta = \arccos(1/\sqrt{3})$  around the axis  $[1\bar{1}0]$  (see figure 2).

Therefore, the elastic free energy density of the film for the (111) orientation is obtained from equation (2) with the stiffness tensor of this orientation; i.e.,

$$f_f = \frac{2}{3}(c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44})(\delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4}\delta_f^4) + \frac{1}{3}(c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44})(\delta_f + \frac{1}{2}\delta_f^2)\phi^2 + \frac{1}{16}(c_{f11} + c_{f12} + 2c_{f44})\phi^4. \quad (7)$$

Similarly, the elastic free energy of the substrate is

$$f_s = \frac{2}{3}(c_{s11} + 2c_{s12} + c_{s44})(\delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4}\delta_s^4). \quad (8)$$

The subscripts (f) and (s) represent the film and substrate materials, respectively. In equation (7),  $\phi = \sqrt{\theta_x^2 + \theta_y^2}$  is a mean slope and it is considered as a scalar order parameter (see [8]).

The isotropic surface energy is written as  $F_{\text{surf}} = \gamma \int dA$ , where  $\gamma$  is the constant surface tension and  $dA$  is the differential surface ( $dA = \sqrt{1 + (\nabla\theta)^2} dx dy$ ). By assuming a small-slope picture, the surface energy is given by

$$F_{\text{surf}} = \gamma \int (1 + \frac{1}{2}\phi^2) dx dy. \quad (9)$$

Accordingly, we define a total free energy surface density in a mean-field description as

$$f_{\text{tot}} = \gamma(1 + \frac{1}{2}\phi^2) + \int_0^{\theta_f} f_f d\theta + \int_{-\theta_s}^0 f_s d\theta \quad (10)$$

which is rewritten in terms of the slope as

$$f_{\text{tot}} = q(\theta) + r(\theta)\phi^2 + s(\theta)\phi^4. \quad (11)$$

The terms  $q(\theta)$ ,  $r(\theta)$  and  $s(\theta)$  are defined in [6]. For  $\alpha = 0$ ,  $f_s = 0$  and all the elastic energy is stored within the film, then the rigid-substrate approximation is recovered. Following the same arguments as those explained in [5, 6], the term  $s(\theta)$  is always positive, while  $r(\theta)$  can be positive or negative in the investigated region of small slopes. For  $\phi = 0$ ,  $f_{\text{tot}}$  represents the total free energy surface density for a flat film.

With respect to stress distribution, it will be analysed in terms of the accumulated stress whose slope yields the incremental stress. The accumulated stress is also referred

to in the literature as film-force, strain-thickness or integrated stress [4, 9].

According to the condition of coherent growth, we define the accumulated stress through the biaxial components of the stress tensor for the substrate and film,

$$\langle \sigma_{xx} \rangle = \int_{-\theta_s}^0 \sigma_{sxx} d\theta + \int_0^{\theta_f} \sigma_{fxx} d\theta. \quad (12)$$

From the elasticity continuum theory, the stress tensor is related to the strain,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} u_{kl} \quad \forall i, j, k, l = x, y, z. \quad (13)$$

With the stiffness tensor for the (111) orientation and the respective strain tensor, we have for the substrate

$$\sigma_{sxx} = \frac{2}{3}(c_{s11} + 2c_{s12} + c_{s44})(\delta_s + \frac{1}{2}\delta_s^2) \quad (14)$$

and for the film

$$\sigma_{fxx} = \frac{2}{3}(c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44})(\delta_f + \frac{1}{2}\delta_f^2) + \frac{1}{4}(c_{f11} + c_{f12} + 2c_{f44})\theta_x^2 + \frac{1}{12}(c_{f11} + 5c_{f12} - 2c_{f44})\theta_y^2. \quad (15)$$

Here again,  $\phi$  is the order parameter [8] and  $\theta_x$  and  $\theta_y$  are directional slopes defined above. Obviously, for  $\alpha = 0$ ,  $\sigma_{sxx} = 0$  and the rigid-substrate approximation is recovered. In this model, we consider  $\theta_x = \theta_y = \phi/\sqrt{2}$ .

Finally, as the height  $\theta$  is expressed in units of number of bilayers ( $n$ ), our results will be given in terms of  $n_f$  (total coverage) and  $n_s$  (bilayers of strained substrate). In the following,  $n_t$  represents the transition thickness and will be discussed in detail. Also, to simplify notation,  $f_{\text{tot}}$  will be referred to hereafter as free energy density. The values of stiffness constants and surface tension parameter are taken from [10]. In particular, for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  alloy we have considered linear interpolation of lattice parameters and stiffness constants of pure Ge and Si, respectively.

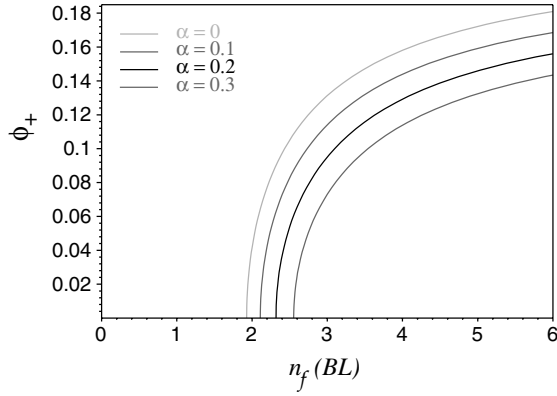
### 3. Results and discussion

To investigate the substrate orientation effects on the typical SK growth mode, we analyse the (111) orientation; i.e. Ge grown on Si(111). Also, we will compare with previous results of Ge/Si(001) heterostructures [6]. For this, we determine the transition thickness ( $n_t$ ) and the accumulated stress. To evaluate the transition thickness, we analyse the stability regions of the free energy density in terms of the slope  $\phi$ , the order parameter. The equilibrium states will be obtained by minimizing the free energy density with respect to  $\phi$ . From equation (11), the extremum points are

$$\phi = 0, \quad \phi_{\pm} = \sqrt{\frac{-r(n)}{2s(n)}}. \quad (16)$$

Following the Landau theory [11], the term  $r(n)$  must vanish at the transition. Attending to the sign change of  $r(n)$ , two well defined stability regimes are obtained. The first regime is characterized by small values of the film coverages; i.e.,  $n_f < n_t$ . In this region,  $r(n_f) > 0$  and  $f_{\text{tot}}$  has only one real minimum located at  $\phi = 0$ . We associate this region with





**Figure 3.** Slope versus coverage for several values of  $\alpha$  in Ge/Si(111) heterostructures.

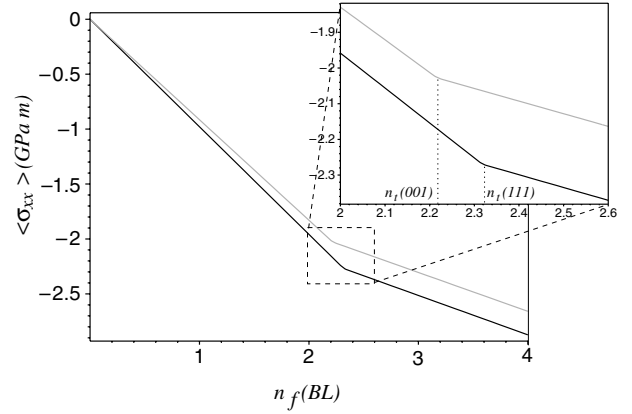
a stable 2D plane configuration (2D growth mode). On the other hand, for  $n_f > n_t$ ,  $r(n_f) < 0$  and  $f_{\text{tot}}$  has a maximum at  $\phi = 0$  and two symmetric minima at  $\phi = \phi_{\pm}$ . This regime can be associated with a new configuration whose slopes are different from zero, that corresponds to the formation of 3D islands above the 2D structure. Therefore, we estimate that the 2D–3D growth transition is characterized by the first value of  $n_f$  at which the slope yielding the minimum value of  $f_{\text{tot}}$  is non-zero. This allows us to define the transition thickness of the system. Figure 3 shows  $\phi_+$  (equation (16)) for Ge/Si(111) as a function of  $n_f$  for several values of  $\alpha$ . From the crossing points, values ranging between 1.9 BL and 2.55 BL are estimated for the transition thickness. The value of 1.9 BL is obtained for  $\alpha = 0$ , which corresponds with the rigid-substrate approximation. For  $\alpha = 0.2$ , the transition thickness of 2.3 BL is in good agreement with that obtained in RHEED experiments [3]. However, higher values of  $\alpha$  yield transition thicknesses farther from the experimental ones.

Therefore, within the framework of our model, this could be interpreted as indicating that the fraction of substrate undertaken by strain reaches nearly 20% of the total coverage. By comparing with our previous results in arbitrarily shaped Ge/Si(001) QDs [6], we find that the fraction of strained substrate is roughly double for the case investigated herein.

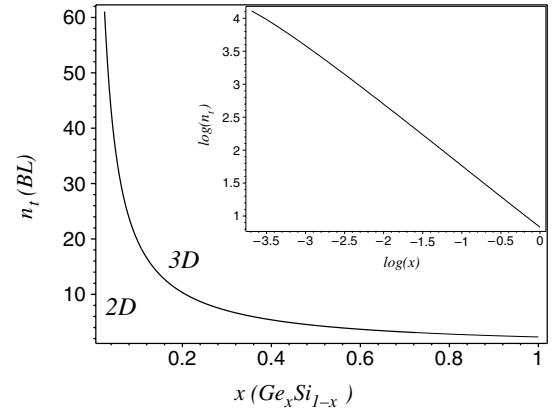
In order to clarify the substrate orientation effects on the Ge/Si heterostructures, the accumulated stresses for the two substrate orientations (001) and (111) are shown in figure 4. In fact, for Ge/Si(001) we take  $\alpha = 0.05$  (see [6]) and for Ge/Si(111),  $\alpha = 0.2$ . As is observed, in both of the orientations, two different stress regimes characterized by two different slopes are obtained. For Ge/Si(111) heterostructures, the first regime extends from the beginning of the film growth up to coverages of approximately 2.3 BL with a slope of  $-2.96$  GPa. This regime is attributed to the 2D growth in the SK mode. For increasing coverages, a second regime characterized by a slope of  $-1.08$  GPa appears. This reduction of incremental stress can be associated with the 3D islanding in the SK mode. The above compressive stresses of  $-2.96$  and  $-1.08$  GPa are roughly similar to that of  $-3.06$  and  $-0.95$  GPa obtained in Ge/Si(001) (see also [6]).

From the above results, two features can be deduced.

- (a) The two stability regions of  $f_{\text{tot}}$  are directly related to the two stress regimes and, consequently, they define the two stages of the SK growth mode.



**Figure 4.** Accumulated stress as a function of the coverage for Ge/Si(001),  $\alpha = 0.05$  (grey line), and Ge/Si(111),  $\alpha = 0.2$  (black line). For both cases:  $\theta_x = \theta_y = \phi/\sqrt{2}$ .



**Figure 5.** Transition thickness as a function of the composition  $x$  for the  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  heterostructure with  $\alpha = 0.2$ . The inset shows  $\log(n_t)$  versus  $\log(x)$ .

- (b) The strain relief mechanisms seem similar for Ge/Si(111) and Ge/Si(001) heterostructures.

Therefore, the non-rigid-substrate approximation would be a realistic approach to study the relaxation phenomenon of heteroepitaxial growth.

In order to investigate the Ge composition effects on the 2D–3D growth transition, we evaluate the transition thickness for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  heterostructures, with different values of Ge content and  $\alpha = 0.2$ . Figure 5 shows the transition thickness values as a function of Ge composition. Obviously, the curve marks the 2D–3D growth transition. The dependence between  $n_t$  and  $x$  scales as  $\sim 1/x$  (see the inset of figure 5), which is similar to that of  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  grown on Si(001). It is shown that as the lattice misfit increases the 2D–3D phase transition appears earlier with a smaller transition thickness. For nearly zero Ge composition in the alloy, the growth is approximately homoepitaxial and phase transition does not occur. We can argue that the island size would be composition dependent. Since two different alloys with the same coverage would have different values for the wetting layer, the island size would be different.

The accumulated stress in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  for different Ge compositions is characterized by two different stress

regimes. The first regime, defined by a higher compressive stress, is associated with the 2D growth, while a reduction of the slope in the second regime is attributed to the 3D islanding. Although they are not shown here, the compressive stresses are smaller for decreasing misfit strain. For instance, in the non-rigid-substrate approximation ( $\alpha = 0.2$ ), slopes of  $-1.67$  and  $-0.67$  GPa are obtained in  $\text{Ge}_{0.5}\text{Si}_{0.5}/\text{Si}(111)$  heterostructures for the first and second regimes, respectively. These compressive stresses are also similar for the substrate  $\text{Si}(001)$  (see [6]).

#### 4. Conclusions

The SK phase transition in  $\text{Ge}/\text{Si}(111)$  heterostructures is compared with that previously investigated in  $\text{Ge}/\text{Si}(001)$ . The analysis of the SK growth mode is made in terms of the transition thickness and the accumulated stress. These magnitudes are evaluated in the framework of the continuum elasticity theory. Two different regimes for  $f_{\text{tot}}$  as well as for the stress distribution are obtained. These regimes are directly related to the two stages of the SK growth mode. Furthermore, the incremental stress is higher in the wetting layer than in the 3D islands. Increasing Miller indices in the substrate induces a delay in the 2D–3D phase transition with a greater wetting layer. However, the relief strain mechanisms seem similar for  $\text{Ge}/\text{Si}(111)$  and  $\text{Ge}/\text{Si}(001)$  heterostructures. Also, the non-rigid substrate approximation yields successful results for the transition thickness and compressive stress values, independently of the substrate orientation. However, a greater fraction of strained substrate is affected by the

relaxation phenomenon in the  $\text{Ge}/\text{Si}(111)$  system. On the other hand, in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(111)$  heterostructures, the transition thickness is Ge dependent and the compressive stresses are smaller for decreasing misfit strain. This feature was also obtained for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ . In future, we will extend the investigations of the substrate orientation effects to III–V low-dimensional heterostructures such as  $\text{InAs}/\text{GaAs}(113)$  and  $\text{InAs}/\text{GaAs}(115)$  in order to check the validity of the non-rigid-substrate approximation.

#### References

- [1] Joyce B A, Jones T S and Belk J G 1998 *J. Vac. Sci. Technol. B* **16** 2373
- [2] Sanguinetti S, Chiantoni G, Grilli E, Guzzi M, Henini M, Polimeni A, Patané A, Eaves L and Main P C 2000 *Mater. Sci. Eng. B* **74** 239
- [3] Voigtländer B 2001 *Surf. Sci. Rep.* **43** 127
- [4] Wedler G, Waltz J, Hesjedal T, Chilla E and Koch R 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2382
- [5] Santalla S N, Kanyinda-Malu C and de la Cruz R M 2003 *Physica E* **17** 480
- [6] Santalla S N, Kanyinda-Malu C and de la Cruz R M 2003 *J. Cryst. Growth* **23** 190
- [7] Landau L D and Lifshitz E M 1986 *Theory of Elasticity* 3rd (revised) edn (Oxford: Pergamon)
- [8] Budiman R A and Ruda H E 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 4586
- [9] Floro J A, Chason E, Lee S R, Twisten R D, Hwang R Q and Freund L B 1997 *J. Electron. Mater.* **26** 969
- [10] Madelung O (ed) 1982 *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* (Landolt–Börnstein New Series) (Berlin: Springer)
- [11] Landau L D and Lifshitz E M 1984 *Physique Statistique* 3rd edn (Moscow: Mir)





# Islanding mechanism and band edges in InAs/GaAs (1 1 *n*) nanostructures

S.N. Santalla\*, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz

*Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid. Av. de la Universidad 30, 28911 Leganés, Madrid, Spain*

Received 6 July 2004; accepted 26 July 2004

Available online 29 September 2004

## Abstract

Within the continuum elasticity theory, we investigate the substrate orientation effects on the Stranski–Krastanov (SK) growth mode and the band edges in InAs/GaAs (1 1 *n*) nanostructures. Attending to the first part of the study, we estimate the transition thickness and the accumulated stress for substrate orientations (1 1 3) and (1 1 5) and we compare with the values obtained previously in InAs/GaAs (00 1) nanostructures. Assuming a coherent behavior at the substrate/film interface in the investigated substrate orientations, we consider a sigmoidal-type function for the dependence of the lattice parameter on the height. To evaluate the transition thickness, a minimization of the total free energy density with the slope is made. Similar to the orientation (00 1), in (1 1 3) and (1 1 5)-oriented substrates, two different stability regimes for the total free-energy density as well as for the accumulated stress are obtained. These regimes are directly related to the two stages of the SK growth mode. Although the relief strain mechanisms seem similar in all orientations, a delay in the 2D–3D phase transition is induced for high Miller indexes of the substrate. The non-rigid substrate approximation applied in InAs/GaAs (1 1 *n*) nanostructures yields successful results for the transition thicknesses; the fraction of strained substrate being greater in InAs/GaAs (1 1 3). On the other hand, within our model, quantum dots formation is predicted for InAs/GaAs (1 1 1) heterostructures. Attending to the second, we find for all substrate orientations investigated, the strain-induced shifts lower the energies of the conduction band edges, while they raise the energies of the heavy- and light-holes band edges. In addition, the energy shifts are less significant for orientation (1 1 3), where the compressive stresses are smaller.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 62.20.Dc; 81.05.Ea; 85.30Vw

Keywords: Stranski–Krastanov growth mode; Substrate orientation; Conduction and holes bands edges

## 1. Introduction

Heteroepitaxial growth of lattice-mismatched semiconductors such as InAs/GaAs system permits

\*Corresponding author. Tel.: +34-91-624-9184; fax: +34-91-624-8749.

E-mail address: [ssantall@fis.uc3m.es](mailto:ssantall@fis.uc3m.es) (S.N. Santalla).

the nucleation, in the Stranski–Krastanov (SK) growth mode, of nanoscale islands with 3D electronic confinement capability, or quantum dots (QDs). The fabrication and development of optoelectronic devices based on the electronic confinement is giving a strong impulse to the study of the islanding mechanism. The main driving force for the SK growth of strained heteroepitaxial layers is the in-island strain relaxation which relieves part of the strain induced by the lattice mismatch between the epitaxial layer and the substrate.

Theoretical calculations and experiments for heteroepitaxial systems have suggested that the effect of the substrate is significant [1,2]. A possible way to handle the strain relaxation in low-dimensional heteroepitaxial strained structures is the use of high-index substrates. In fact, the PL spectra of InAs on (3 1 1) B and (5 1 1) B GaAs substrates revealed a delay in the 3D growth mode onset of the SK pattern [3]. Despite the existence of the 2D–3D transition in these high-index substrates, the question becomes crucial when one analyzes the (1 1 1) oriented substrate. Some authors reported the suppression of SK growth mode when InAs layers are grown on (1 1 0) and (1 1 1) A-oriented GaAs substrates. In both cases, the InAs epilayers follows 2D layer-by-layer process where the strain relaxation is relieved by misfit dislocations [4,5]. Besides this commonly accepted feature, González-Borrero et al. [6] have observed the formation of QDs for GaAs (1 1 1) A/B substrate orientations. Also, the same authors have systematically analyzed the possibility of QDs formation for higher index Miller GaAs orientations such as (1 1 5) and (1 1 7). Other PL measurements in InGaAs/GaAs heterostructures confirmed the formation of QDs for (1 1 1) B-oriented GaAs substrates [7]. Since then, scientists devoted many efforts to find out the real effect of higher Miller index substrates on the SK growth mechanism and its influences on electronic and optical properties of strained heterostructures.

On the other hand, the strain induced in these lattice-mismatched heterostructures modifies their band structures that determined the PL peaks and other optical transitions. In particular, it is known that for ( $n$  1 1) GaAs substrates, the off-diagonal

strain tensor components are non-zero and this induces a piezoelectric field, which affects significantly the electronic structures and optical properties of InAs/GaAs heterostructures grown on high Miller index substrates [8,9]. Following our previous works [10,11], we characterize the SK growth mode, through the determination of the 2D–3D transition thickness and accumulated stress for InAs grown on (1 1  $n$ ) substrate orientations, with  $n = 3, 5$ . The obtained results are discussed with respect to the InAs/GaAs (0 0 1) SK growth mode. Also, an analysis of the islanding mechanism for the (1 1 1) substrate orientation is made. Both strain relaxation and islanding mechanism are described using the elasticity continuum theory, where the relaxation is defined through a sigmoidal relationship between the lattice parameter and the island height. Besides, the non-rigid substrate approximation is used [10,11], assuming a coherent behavior at the substrate/film interface. The obtained strain tensor components are used to discuss the effect of the substrate orientations on conduction, heavy- and light-hole band-edge energies using the respective deformation potentials [12]. In this study, kinetical aspects of the SK growth mechanism are not considered, neither are the possible effects of the A/B substrate terminations on the above parameters. The paper is organized as follows. In Section 2, we describe the theoretical model with special emphasis given to the transformation relations which take into account the substrate orientations. The implementation of the model and discussion of the results are developed in Section 3. Finally, the main remarks and conclusion of this work will be given in Section 4.

## 2. Theoretical model

The non-rigid substrate approximation is based on the hypothesis that film and substrate materials are deformed by the misfit strain. Therefore, the elastic energy is stored within both of them. Surface description for the SK pattern scheme is similar to that described in Refs. [10,11,13]; so here, we only recall the major premises. In the

model, we denoted the deposited film thickness by  $\theta(x, y)$ , where  $(x, y)$  represent the coordinates of the planar film/substrate interface. Also, we consider that a fraction of the substrate thickness ( $\theta_s$ ) participates in the strain relaxation, i.e.,  $\theta_s = \alpha \theta_f$ , with  $0 \leq \alpha < 1$ ,  $\theta_f$  being the top of the island.

To describe the relaxation mechanism, we propose a sigmoidal law which defines the lattice dependence with the thickness, i.e.,

$$a(\theta) = A + \frac{B}{1 + C \exp[-\theta \ln D / (\theta_s + \theta_f)]}. \quad (1)$$

The constants  $A$ ,  $B$ ,  $C$  and  $D$  are obtained by imposing appropriate constraint conditions: (i)  $a(-\theta_s) = a_s(1 + \chi)$ ; (ii)  $a(\theta_f) = a_f(1 - \chi)$ ; (iii)  $a(\theta) \rightarrow a_f$  when  $\theta \rightarrow \infty$ ; and (iv)  $a(\theta) \rightarrow a_s$  when  $\theta \rightarrow -\infty$ . For this study, we take  $\chi = 0.001$ .

From the continuum elasticity theory, the elastic free energy density for a thin volume layer is expressed as [14]

$$f_e = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \quad (2)$$

where  $C_{ijkl}$  is the stiffness tensor and  $\varepsilon_{ij}$  is the strain tensor defined in terms of derivatives of the displacement vector. For cubical crystals such as InAs and GaAs, the unique non-zero stiffness constants are  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  and  $c_{44}$  [14]. The expressions for the film and substrate displacement vectors are taken from Ref. [10]. Then, the non-null strain tensor components for the film are

$$\varepsilon_{fxx} = \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 + \frac{1}{2} \theta_x^2, \quad (3a)$$

$$\varepsilon_{fyy} = \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 + \frac{1}{2} \theta_y^2, \quad (3b)$$

$$\varepsilon_{fxy} = \varepsilon_{fyx} = \frac{1}{2} \theta_x \theta_y, \quad (3c)$$

and for the substrate

$$\varepsilon_{sxx} = \varepsilon_{syy} = \delta_s + \frac{1}{2} \delta_s^2, \quad (4)$$

where  $\theta_x$  and  $\theta_y$  are the slopes along the  $x$  and  $y$  directions. Notice that these slopes are obtained by minimization of the free-energy density as it will be shown in the next section.  $\delta_f$  and  $\delta_s$  are

the effective misfits, defined by  $\delta_f = a(\theta)/a_f - 1$  and  $\delta_s = a(\theta)/a_s - 1$ ,  $a_f$  and  $a_s$  being the film and substrate lattice constants without strain, respectively.

For any arbitrary crystal orientation, the four-rank tensor  $C_{mnop}$  can be obtained from the (001) stiffness tensor  $C_{ijkl}$  following the relation:

$$C_{mnop} = a_{mi} a_{nj} a_{ok} a_{pl} C_{ijkl}, \quad (5)$$

where  $a_{\alpha\beta}$  ( $\forall \alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ ) are the rotation matrix elements. In particular, for the (111), (113) and (115) orientations, the corresponding rotation matrixes are

$$[a]_{(111)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix}, \quad (6a)$$

$$[a]_{(113)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{11}}{22} & -\frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{11}}{22} & -\frac{\sqrt{11}}{11} \\ -\frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{11}}{22} & \frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{11}}{22} & -\frac{\sqrt{11}}{11} \\ \frac{\sqrt{11}}{11} & \frac{\sqrt{11}}{11} & \frac{3\sqrt{11}}{11} \end{pmatrix}, \quad (6b)$$

$$[a]_{(115)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{5\sqrt{3}}{18} & -\frac{1}{2} + \frac{5\sqrt{3}}{18} & -\frac{\sqrt{3}}{9} \\ -\frac{1}{2} + \frac{5\sqrt{3}}{18} & \frac{1}{2} + \frac{5\sqrt{3}}{18} & -\frac{\sqrt{3}}{9} \\ \frac{\sqrt{3}}{9} & \frac{\sqrt{3}}{9} & \frac{5\sqrt{3}}{9} \end{pmatrix}. \quad (6c)$$

For illustration, Fig. 1 shows the direct rotation used for the (113) orientation from that oriented (001). The remainder of rotation are obtained similarly using appropriate angles around the axis  $[1\bar{1}0]$ . Then, the elastic free-energy density of the film for the above orientations is obtained from Eq. (2) with the stiffness tensor corresponding to the specific orientations (111), (113) or (115), i.e.,

$$\begin{aligned} f_f(111) &= \frac{2}{3} (c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44}) \left( \delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4} \delta_f^4 \right) \\ &+ \frac{1}{3} (c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44}) \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \phi^2 \\ &+ \frac{1}{16} (c_{f11} + c_{f12} + 2c_{f44}) \phi^4, \end{aligned} \quad (7a)$$

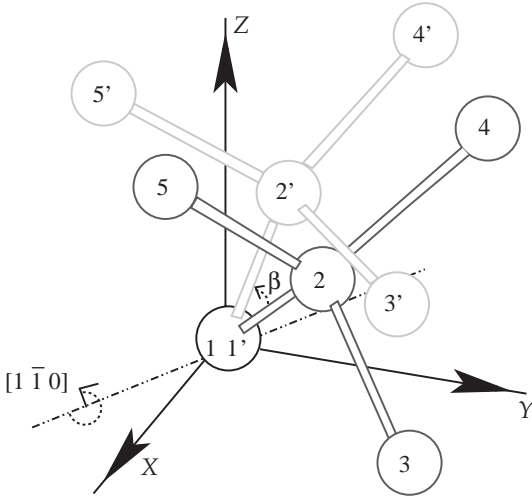


Fig. 1. Rotation from (001) to (113) with angle  $\beta = \arccos(3/\sqrt{11})$  around the axis  $[1 \bar{1} 0]$  in the diamond structure.

$$\begin{aligned}
 f_f(113) &= \frac{1}{121} (102c_{f11} + 140c_{f12} + 38c_{f44}) \\
 &\times \left( \delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4} \delta_f^4 \right) \\
 &+ \frac{1}{121} (51c_{f11} + 70c_{f12} + 19c_{f44}) \\
 &\times \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \phi^2 \\
 &+ \frac{1}{1936} (153c_{f11} + 89c_{f12} + 178c_{f44}) \phi^4, \quad (7b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_f(115) &= \frac{1}{243} (226c_{f11} + 260c_{f12} + 34c_{f44}) \\
 &\times \left( \delta_f^2 + \delta_f^3 + \frac{1}{4} \delta_f^4 \right) \\
 &+ \frac{1}{243} (113c_{f11} + 130c_{f12} + 17c_{f44}) \\
 &\times \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \phi^2 \\
 &+ \frac{1}{1296} (113c_{f11} + 49c_{f12} + 98c_{f44}) \phi^4. \quad (7c)
 \end{aligned}$$

Similarly, the elastic free energy of the substrate for each orientation is

$$\begin{aligned}
 f_s(111) &= \frac{2}{3} (c_{s11} + 2c_{s12} + c_{s44}) \\
 &\times \left( \delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4} \delta_s^4 \right), \quad (8a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_s(113) &= \frac{1}{121} (102c_{s11} + 140c_{s12} + 38c_{s44}) \\
 &\times \left( \delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4} \delta_s^4 \right), \quad (8b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_s(115) &= \frac{1}{243} (226c_{s11} + 260c_{s12} + 34c_{s44}) \\
 &\times \left( \delta_s^2 + \delta_s^3 + \frac{1}{4} \delta_s^4 \right). \quad (8c)
 \end{aligned}$$

The subscripts f and s refer to the film and substrate materials, respectively. In Eqs. (7a)–(7c),  $\phi = \sqrt{\theta_x^2 + \theta_y^2}$  is a mean slope and is considered as a scalar order parameter (see Ref. [15]).

The isotropic surface energy for a specific orientation  $\mu = \{hkl\}$  (herein  $\mu$  denotes a compact index for the Miller indexes  $(hkl)$ ) is written as  $F_{\text{surf},\mu} = \gamma_\mu \int dA$ , where  $\gamma_\mu$  is the constant surface tension for the orientation  $\mu$  and  $dA$  is the differential surface that is given by  $dA = \sqrt{1 + (\nabla\theta)^2} dx dy$ . Notice that the constant surface tension is related to the number of atoms per unit area. Then, according to Nakajima [16], the surface tension depends on the substrate orientation. By assuming a small-slope picture, the surface energy is given by

$$F_{\text{surf},\mu} = \gamma_\mu \int \left( 1 + \frac{1}{2} \phi^2 \right) dx dy. \quad (9)$$

Accordingly, we define for each orientation  $\mu$  the total free-energy surface density in a mean-field description as

$$\begin{aligned}
 f_{\text{tot},\mu} &= \gamma_\mu \left( 1 + \frac{1}{2} \phi^2 \right) \\
 &+ \int_0^{\theta_f} f_{f,\mu} d\theta + \int_{-\theta_s}^0 f_{s,\mu} d\theta, \quad (10)
 \end{aligned}$$

where  $f_{f,\mu}$  and  $f_{s,\mu}$  are given by Eqs. (7a)–(7c) and (8a)–(8c), respectively.  $f_{\text{tot},\mu}$  can be rewritten in

terms of the slope as

$$f_{\text{tot},\mu} = q_{\mu}(\theta) + r_{\mu}(\theta)\phi^2 + s_{\mu}(\theta)\phi^4. \quad (11)$$

The terms  $q_{\mu}(\theta)$ ,  $r_{\mu}(\theta)$  and  $s_{\mu}(\theta)$  are defined in a similar manner as in Ref. [10] for each orientation. The value  $\alpha = 0$  yields  $f_{s,\mu} = 0$  and all the elastic energy is stored within the film, then the rigid substrate approximation is recovered. Following the same arguments explained in Ref. [10], the term  $s_{\mu}(\theta)$  is always positive, while  $r_{\mu}(\theta)$  can be positive or negative in the investigated region of small slopes.

With respect to the stress distribution, it will be analyzed in terms of the accumulated stress whose slope yields the incremental stress or compressive stress. The accumulated stress is also referred in the literature as film-force, strain-thickness or integrated stress [17,18].

According to the condition of coherent growth, we define the accumulated stress through the biaxial components of the stress tensor for the substrate and film materials

$$\langle \sigma_{xx} \rangle = \int_{-\theta_s}^0 \sigma_{sxx} d\theta + \int_0^{\theta_f} \sigma_{fxx} d\theta. \quad (12)$$

From the elasticity continuum theory, the stress tensor is related to the strain,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \forall i, j, k, l = x, y, z. \quad (13)$$

With the stiffness tensor for each orientation and the respective strain tensor, we have for the substrate in (1 1 1), (1 1 3) and (1 1 5) orientations

$$\begin{aligned} \sigma_{sxx}(1\ 1\ 1) &= \frac{2}{3}(c_{s11} + 2c_{s12} + c_{s44}) \\ &\times \left( \delta_s + \frac{1}{2} \delta_s^2 \right), \end{aligned} \quad (14a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{sxx}(1\ 1\ 3) &= \frac{1}{121}(102c_{s11} + 140c_{s12} + 38c_{s44}) \\ &\times \left( \delta_s + \frac{1}{2} \delta_s^2 \right), \end{aligned} \quad (14b)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{sxx}(1\ 1\ 5) &= \frac{1}{243}(226c_{s11} + 260c_{s12} + 34c_{s44}) \\ &\times \left( \delta_s + \frac{1}{2} \delta_s^2 \right) \end{aligned} \quad (14c)$$

and for the film

$$\begin{aligned} \sigma_{fxx}(1\ 1\ 1) &= \frac{2}{3}(c_{f11} + 2c_{f12} + c_{f44}) \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \\ &+ \frac{1}{4}(c_{f11} + c_{f12} + 2c_{f44})\theta_x^2 \\ &+ \frac{1}{12}(c_{f11} + 5c_{f12} - 2c_{f44})\theta_y^2, \end{aligned} \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{fxx}(1\ 1\ 3) &= \frac{1}{121}(102c_{f11} + 140c_{f12} + 38c_{f44}) \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \\ &+ \frac{1}{484}(153c_{f11} + 89c_{f12} + 178c_{f44})\theta_x^2 \\ &+ \frac{1}{484}(51c_{f11} + 191c_{f12} - 102c_{f44})\theta_y^2, \end{aligned} \quad (15b)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{fxx}(1\ 1\ 5) &= \frac{1}{243}(226c_{f11} + 260c_{f12} + 34c_{f44}) \left( \delta_f + \frac{1}{2} \delta_f^2 \right) \\ &+ \frac{1}{324}(113c_{f11} + 49c_{f12} + 98c_{f44})\theta_x^2 \\ &+ \frac{1}{324}(113c_{f11} + 373c_{f12} - 226c_{f44})\theta_y^2. \end{aligned} \quad (15c)$$

Here again,  $\phi$  is the order parameter [15] and  $\theta_x$  and  $\theta_y$  are directional slopes defined above. Obviously, for  $\alpha = 0$ ,  $\sigma_{sxx} = 0$  and corresponds to the rigid substrate approximation. In this model, we consider  $\theta_x = \theta_y = \phi/\sqrt{2}$  which will be different for each substrate orientation as will be shown in the next section.

On the other hand, to take into account the strain-induced modification of the bands structure, we assume the multi-band  $k \cdot p$  method applied in Ref. [12]. This method describes coupling among the light-hole, heavy-hole and split-off valence bands to second order in  $k$ , while the coupling between conduction and valence states is linear. Within this scheme, the conduction band edge is given by [12]

$$E_c = E_{v,av}^0 + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \delta E_c, \quad (16)$$

where  $E_{v,av}^0$  is the unstrained average valence band edge,  $\Delta_0$  is the spin-orbit splitting,  $E_g$  is the unstrained band gap and  $\delta E_c$  is the strain-induced

shift of the conduction band defined as  $\delta E_c = a_c \varepsilon_h$ . Here  $a_c$  represents the deformation potential, while  $\varepsilon_h$  is the hydrostatic strain ( $\varepsilon_h = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ ). The heavy- and light-hole energy bands couple to the individual strain components via the relations

$$E_v^{\text{hh}} = E_{v,\text{av}}^0 + \frac{\Delta_0}{3} + \delta E_{v,\text{h}} - \frac{1}{2} \delta E_{v,\text{b}} \quad (17)$$

and

$$E_v^{\text{lh}} = E_{v,\text{av}}^0 - \frac{\Delta_0}{6} + \delta E_{v,\text{h}} - \frac{1}{4} \delta E_{v,\text{b}} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{v,\text{b}} + \frac{9}{4} (\delta E_{v,\text{b}})^2}, \quad (18)$$

where  $\delta E_{v,\text{h}} = a_v \varepsilon_h$  and  $\delta E_{v,\text{b}} = b \varepsilon_b$ ,  $a_v$  and  $b$  being the deformation potentials and  $\varepsilon_b$  the biaxial strain ( $\varepsilon_b = \varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$ ). From Eqs. (16)–(18), the unstrained conduction, heavy- and light-holes band edges are  $E_c(\text{unstrained}) = E_{v,\text{av}}^0 + \Delta_0/3 + E_g^0$  and  $E_v^{\text{hh}}(\text{unstrained}) = E_v^{\text{lh}}(\text{unstrained}) = E_{v,\text{av}}^0 + \Delta_0/3$ , respectively. Thus, for the heavy-hole energy band, we define a strain-induced shift as  $\delta E_v^{\text{hh}} = \delta E_{v,\text{h}} - \delta E_{v,\text{b}}/2$ , while for the light-hole band an energy shift can be defined as  $\delta E_v^{\text{lh}} = \delta E_{v,\text{h}} - \delta E_{v,\text{b}}/4 + (9(\delta E_{v,\text{b}})^2/4 + \Delta_0 \delta E_{v,\text{b}} + \Delta_0^2)^{1/2}/2 - \Delta_0/2$ , which is obtained from the difference between Eq. (18) and the unstrained light-hole band edge. Obviously, for each investigated orientation, the band energy will be different since hydrostatic and biaxial strains depend on orientation through  $\theta_x$  and  $\theta_y$  (see Eqs. (3a)–(3b)).

Finally, as the height  $\theta$  is expressed in units of number of monolayers ( $n$ ), our results will be given in terms of  $n_f$  (total coverage) and  $n_s$  (monolayers of strained substrate). In the following,  $n_t$  represents the transition thickness and will be discussed in detail. Also, to simplify notation,  $f_{\text{tot},\mu}$  will be referred to hereafter as free-energy density. The values of the stiffness constants are taken from Ref. [19]. The surface tension parameters for each orientation are evaluated following Ref. [16]. The values of the deformation potentials, spin-orbit splitting, unstrained band gap and average valence band edge are listed in Table 1.

Table 1

InAs parameters involved in the evaluation of the conduction, heavy- and light-holes band edges

$E_g$ (eV)	$E_{\text{av}}^0$ (eV)	$\Delta_0$ (eV)	$a_v$ (eV)	$a_c$ (eV)	$b$ (eV)
0.41	−6.67	0.38	1.00	−5.08	−1.8

The data are taken from Ref. [20].

### 3. Results and discussion

To investigate the substrate orientation effects on the islanding mechanism in InAs/GaAs heterostructures, we determine the transition thickness ( $n_t$ ) and the accumulated stress for orientations (1 1 1), (1 1 3) and (1 1 5), and we will compare with previous results of the GaAs (0 0 1) substrate [13]. To evaluate the transition thickness, we analyze the stability regions of the free-energy density in terms of the slope  $\phi$ , the order parameter. The equilibrium states are obtained by minimizing the free-energy density with respect to  $\phi$ . From Eq. (11), the extrema points for each orientation  $\mu$  are

$$\phi = 0, \quad \phi_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{-r_{\mu}(n)}{2s_{\mu}(n)}}. \quad (19)$$

Following the Landau theory [21], the term  $r_{\mu}(n)$  must vanish at the transition. Attending to the sign change of  $r_{\mu}(n)$ , two well-defined stability regimes are obtained. The first regime is characterized by small values of the film coverage, i.e.,  $n_f < n_t$ . In this region,  $r_{\mu}(n_f) > 0$  and  $f_{\text{tot},\mu}$  has only one real minimum located at  $\phi = 0$ . We associate this region with a stable 2D plane configuration (2D growth mode). On the other hand, for  $n_f > n_t$ ,  $r_{\mu}(n_f) < 0$  and  $f_{\text{tot},\mu}$  has a maximum at  $\phi = 0$  and two symmetric minima at  $\phi = \phi_{\pm}$ . This regime can be associated with a new configuration whose slopes are different from zero and correspond to the formation of 3D islands above the 2D structure. Therefore, we estimate that the 2D–3D growth transition is characterized by the first value of  $n_f$  at which the slope yielding minimum value of  $f_{\text{tot},\mu}$  is non-zero. This allows us to define the transition thickness of the system. Fig. 2 shows  $\phi_+$



(Eq. (19)) for InAs/GaAs with substrate orientations (1 1 3) and (1 1 5) as a function of  $n_f$  and for specific values of  $\alpha$ . The previously obtained results for orientation (0 0 1) [13] are also included in Fig. 2 for comparison. The values of  $\alpha$  are adjusted so that the crossing points (see Fig. 2) yield transition thicknesses which agree with those obtained from PL experiments [3]. For the substrate orientation (1 1 3), we obtain  $n_t = 2.07$  ML with  $\alpha = 0.45$ , while for orientation (1 1 5) we estimate  $n_t = 1.92$  ML with  $\alpha = 0.35$ . For GaAs (0 0 1) substrate,  $\alpha = 0.25$  yields  $n_t = 1.78$  ML. Other values of  $\alpha$  in each orientation, including the case  $\alpha = 0$  which corresponds with the rigid substrate approximation, yield transition thicknesses farther from the experimental ones. Within the framework of our model, the above results indicate that the fraction of substrate undertaken by strain reaches nearly 45% of the total coverage for the orientation (1 1 3) and 35% for the (1 1 5)-oriented substrate, while only 25% was found for the case (0 0 1). That means that during its relaxation, the epilayered film drags some underlying layers of the substrate, which in turn produce deformation, even outside the contact area. Indeed, a significant strain relaxation process occurring within the substrate for Ge(Si)/Si QDs is also reported in the literature, where the displacement in-plane components reach into the substrate up to approximately  $\frac{2}{3}$  of the island height [1].

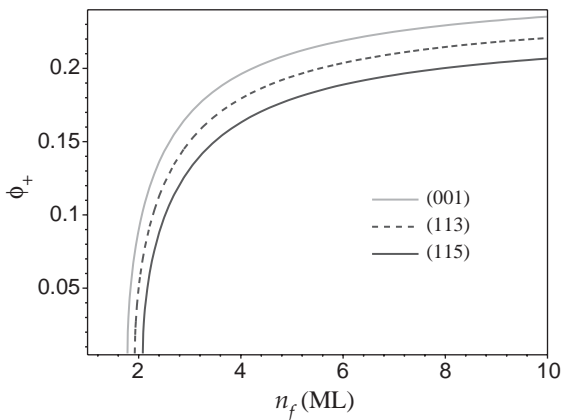


Fig. 2. Slope versus coverages for InAs/GaAs (0 0 1) ( $\alpha = 0.25$ ), InAs/GaAs (1 1 3) ( $\alpha = 0.45$ ) and InAs/GaAs (1 1 5) ( $\alpha = 0.35$ ).

Furthermore, the slopes tend to reach asymptotic values ranging in the interval 0.22–0.25. These asymptotic slopes are roughly similar to the experimental value of 0.22 obtained in InAs/GaAs (0 0 1) QDs grown epitaxially at 550 °C [22]. With respect to the orientation (1 1 1), there are controversial results in the literature about the existence of an islanding mechanism. Within our model and taking an average value of  $\alpha = 0.4$ , we obtain a transition thickness of 1.87 ML. This result would confirm the predictions of González-Borrero et al. [6] about the formation of QDs, even if these authors do not discuss the wetting layer thickness. In a similar manner, the delay in the 3D growth mode onset in the SK pattern along with the increasing of substrate fraction undertaken by strain when the substrate orientation departs from (0 0 1), was also obtained in Ge/Si heterostructures [10]. Therefore, it seems that the delay in the 3D growth mode onset is accompanied with a great contribution of the substrate in the strain relaxation phenomenon for high-index substrate orientations.

To complete the analysis of the substrate orientation effects on the islanding mechanism of InAs/GaAs heterostructures, we determine the accumulated stress for different orientations. In Fig. 3, the accumulated stress for (0 0 1)- and (1 1 3)-oriented substrates are shown. In each orientation, two different stress regimes characterized by two slopes are obtained. The first regime extends from the beginning of the film growth up to coverages of approximately the transition thicknesses, i.e., 1.78 ML for (0 0 1) and 2.07 ML for (1 1 3). This regime, where the compressive stresses are greater, is attributed to the 2D growth in the SK mode. For increasing coverages, a second regime characterized by smaller compressive stresses appears. This reduction of incremental stress, which corresponds to a strain relief, can be associated with the 3D islanding in the SK mode of each orientation. Although in Fig. 3 the accumulated stresses for (1 1 1) and (1 1 5) GaAs substrates are not plotted, their behaviors are similar to those obtained for other orientations. For clarity, the values of the compressive stresses, which characterize the two regimes for the investigated oriented substrates, are listed in



Table 2 along with the values of  $\alpha$  used to evaluate the accumulated stress. These values are adjusted previously to obtain transition thicknesses in good agreement with the experimental ones. By comparing all substrate orientations, we find that in the first regime, the compressive stress is greater in (001) and smaller in (113)-oriented substrates. In the second regime, the tendency of the compressive stresses with the substrate orientation is similar, it being greater in (001) and smaller in (113).

From the above results, several features can be deduced: (a) for all orientations, the two stability regions of  $f_{\text{tot}}$  are directly related to the two stress regimes and consequently, they define the two stages of SK growth mode. (b) Although the strain relief mechanisms in InAs/GaAs heterostructures seem similar for different substrate orientations, a delay in the 3D growth mode is observed when Miller indexes depart from (001). In addition, smaller compressive stresses are obtained for

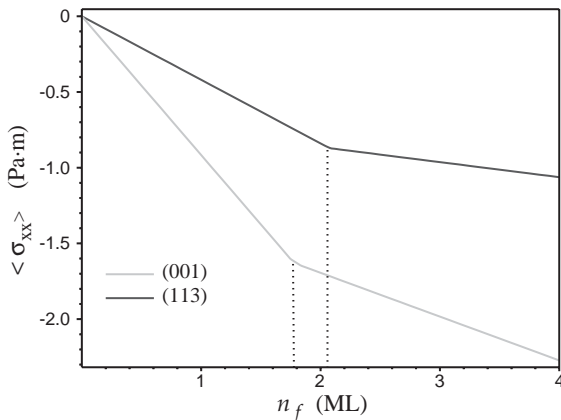


Fig. 3. Accumulated stress as a function of the coverage for InAs/GaAs (001) ( $\alpha = 0.25$ ) and InAs/GaAs (113) ( $\alpha = 0.45$ ).

Table 2

Compressive stresses of the first and second regimes of the accumulated stress for InAs/GaAs heterostructures along with the appropriate values of  $\alpha$  for each substrate orientation

	(001) $\alpha = 0.25$ (GPa)	(111) $\alpha = 0.40$ (GPa)	(113) $\alpha = 0.45$ (GPa)	(115) $\alpha = 0.35$ (GPa)
1st regime	−3.02	−2.67	−2.30	−2.63
2nd regime	−0.98	−0.71	−0.55	−0.79

orientation (113) where the delay and the participation of the substrate in the strain relaxation phenomenon are more significant. (c) In InAs/GaAs (111) heterostructures, the islanding mechanism is predicted.

Once the islanding mechanism in the SK pattern is investigated in the different GaAs substrate orientations, we will analyze the modification of bands structure by strain in InAs/GaAs heterostructures with (001)-, (113)- and (115)-orientated substrates as a function of the total coverage. From Eqs. (16)–(18), the conduction, heavy- and light-holes band energies are expressed by means of the deformation potentials and the biaxial and hydrostatic strains. On the other hand, the biaxial and hydrostatic strains are defined in terms of the strain tensor components (Eqs. (3a)–(3b)) and they clearly depend on the substrate orientation as well as the coverage. Notice that for a given coverage  $n_f$ , the slope values are different for each substrate orientation (see Fig. 2). Also, for a given substrate orientation, the slope increases with the coverage to reach approximately an asymptotic value (see Fig. 2). To calculate the bands energies, we use the orientation-dependent values of  $\alpha$  which give the best agreement with experimental transition thicknesses. Figs. 4, 5 and 6 show the conduction, heavy- and light-holes band edges as a function of the total coverage once the 2D–3D growth transition takes place in InAs/GaAs heterostructures with (001), (113) and (115) substrate orientations, respectively. Also, in the above figures the unstrained band edges are shown.

In fact, the dependence of the conduction band edge with the coverage is similar for the three substrate orientations, i.e., these energies decrease with the coverage to reach approximately asymptotic values (see Fig. 4). Then, the strain-induced

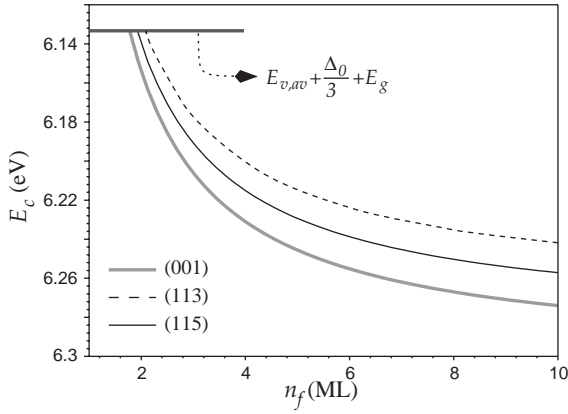


Fig. 4. Conduction band edge versus coverage of InAs/GaAs heterostructures for different substrate orientations.

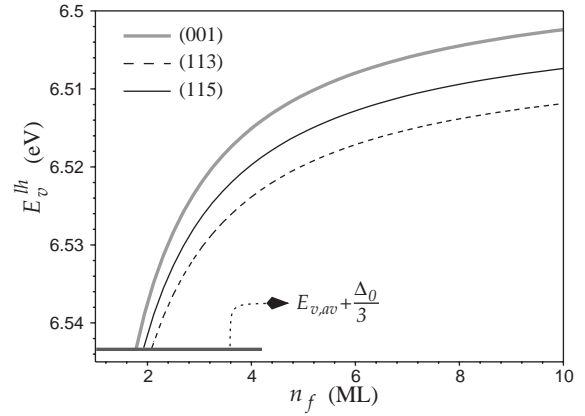


Fig. 6. Light-hole band edge versus coverage of InAs/GaAs heterostructures for different substrate orientations.

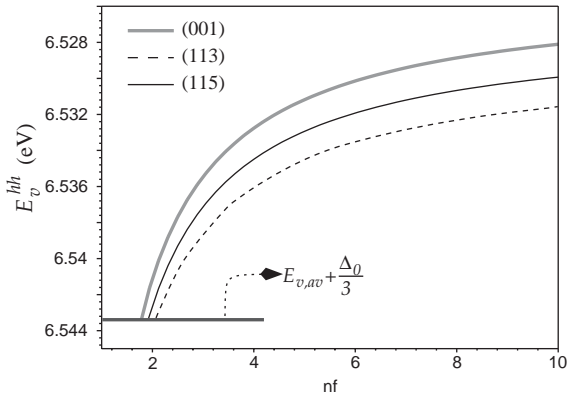


Fig. 5. Heavy-hole band edge versus coverage of InAs/GaAs heterostructures for different substrate orientations.

effect is to lower the unstrained conduction band edge; the energy shift being more significant for (001) and less noticeable for (113) over all ranges of investigated coverages. Therefore, independent of the substrate orientation, the strain effect on the conduction band edge is higher for increasing coverages. However, for the heavy- and light-holes band edges, we find that the energies increase with the coverage to reach approximately asymptotic values, this behavior being similar for the three substrate orientations (see Figs. 5, 6). Thus, the strain-induced effect on the heavy- and light-holes

bands is to raise the unstrained edges, equal then for the conduction, the energy shifts are more significant for the (001)-oriented substrate and less relevant for (113). Also, the strain effect is higher for coverages farther from the transition thicknesses. This feature is observed for the energies of the three substrate orientations. On the other hand, an aspect which is shared for the conduction, heavy- and light-holes band edges is the following. For coverages close to the transition thicknesses, the energies of the three substrate orientations differ little, while these differences seem to increase for higher coverages to reach approximately constant values (see Figs. 4–6).

From the above results, several features can be deduced: (a) the energy shifts from the unstrained conduction, heavy- and light-holes band edges of the different substrate orientations seem to be related with the compressive stress values of the second regime which characterizes the accumulated stress. For (001)-oriented substrate, the energy shifts and the compressive stress are greater, while for orientation (113) the energy shifts and the compressive stress are smaller. Intermediate values are found for (115). Therefore, it seems reasonable to admit that for substrates which are more stressed, the strain-induced effect on the energies is more significant. (b) The substrate orientation effect on the conduction, heavy- and light-holes band edges is more relevant when the

islands tend to stabilize after the first undulations of the surface take place in the 2D–3D growth transition, i.e., for higher coverages. (c) The energy shifts from the unstrained band edges would affect the PL peaks and other optical transitions in InAs/GaAs heterostructures.

#### 4. Conclusions

Substrate orientation effects on the islanding mechanism of SK growth mode and band edges are investigated in InAs/GaAs heterostructures. The analysis of the SK growth mode is made in terms of the transition thickness and the accumulated stress. These magnitudes are evaluated in the framework of the continuum elasticity theory. For (113) and (115) orientations, two different regimes for  $f_{\text{tot},\mu}$  as well as for the accumulated stresses are obtained, similar to the case (001) previously investigated. These regimes are directly related to the two stages of the SK growth mode. Independent of the investigated orientation, the incremental stress is higher in the wetting layers than in the 3D islands. Although the relief strain mechanisms seem similar in the above substrate orientations, a delay in the 2D–3D phase transition is induced for high Miller indexes of the substrate. In fact, for InAs/GaAs (113) heterostructures, a transition thickness of 2.07 ML is obtained. Within our model, 2D–3D phase transition is predicted for InAs/GaAs (111) heterostructures. Also, the non-rigid substrate approximation yields successful results for the transition thickness values in the investigated orientations. Greater fractions of strained substrate affected by relaxation phenomena are obtained when the substrate orientation departs from (001). This tendency is similar for the previously investigated Ge/Si heterostructures. Therefore, this approximation seems to be a realistic approach to study the relaxation phenomenon of heteroepitaxial growth for crystals with diamond structure. On the other hand, the substrate orientation effect on the conduction, heavy- and light-holes band edges is clearly observed for higher coverages after the first undulations of the surface take place in the

2D–3D growth transition, the strain-induced shifts being less significant for orientation (113), where the compressive stresses are smaller. Also, for the three investigated substrate orientations, the shifts lower the energies of the conduction band edges, while they raise the energies of the heavy- and light-holes band edges.

#### References

- [1] S. Christiansen, M. Albrecht, H.P. Strunk, H.J. Maier, *Appl. Phys. Lett.* 64 (1994) 3617.
- [2] L.J. Gray, M.F. Chisholm, T. Kaplan, *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995) 1924.
- [3] S. Sanguinetti, G. Chiantoni, E. Grilli, M. Guzzi, M. Henini, A. Polomeni, A. Patané, L. Eaves, P.C. Main, *Mater. Sci. Eng. B* 74 (2000) 239.
- [4] B.A. Joyce, T.S. Jones, J.G. Belk, *J. Vac. Sci. Technol. B* 16 (1998) 2372.
- [5] B.A. Joyce, D.D. Vvedensky, G.R. Bell, J.G. Belk, M. Itoh, T.S. Jones, *Mater. Sci. Eng. B* 67 (1999) 7.
- [6] P.P. González-Borrero, E. Marega, D.I. Lubyshev, E. Petitprez, P. Basmaji, *J. Crystal Growth* 175/176 (1997) 765.
- [7] F.Y. Tsai, C.P. Lee, *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 2624.
- [8] S. Sanguinetti, M. Gurioli, E. Grilli, M. Guzzi, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 1982.
- [9] A. Patané, A. Levin, A. Polimeni, F. Schindler, P.C. Main, L. Eaves, M. Henini, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 2979.
- [10] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, *J. Crystal Growth* 253 (2003) 190.
- [11] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, *Nanotechnology* 15 (2004) S215.
- [12] V.G. Stoleru, D. Pal, E. Towe, *Physica E* 15 (2002) 131.
- [13] S.N. Santalla, C. Kanyinda-Malu, R.M. de la Cruz, *Physica E* 17 (2003) 480.
- [14] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, vol. 7, 3rd (revised) ed., Pergamon Press, Oxford, 1986.
- [15] R.A. Budiman, H.E. Ruda, *J. Appl. Phys.* 88 (2000) 4586.
- [16] K. Nakajima, *Jpn. J. Appl. Phys.* 38 (1999) 1875.
- [17] G. Wedler, J. Waltz, T. Hesjedal, E. Chilla, R. Koch, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2382.
- [18] J.A. Floro, E. Chason, S.R. Lee, R.D. Twisten, R.Q. Hwang, L.B. Freund, *J. Electron. Mater.* 26 (1997) 969.
- [19] Landlot Börstein: O. Madelung (Ed.), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, Springer, Berlin, 1982.
- [20] C.G. Van de Valle, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 1871.
- [21] L. Landau, E. Lifshitz, *Physique statistique*, 3rd ed., Tome V, Mir, Moscou, 1984.
- [22] Y. Ebiko, S. Muto, D. Suzuki, S. Itoh, H. Yamakoshi, K. Shiramine, T. Haga, K. Unno, M. Ikeda, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 8234.

# On the lattice parameter profiles in the Stranski–Krastanov growth mode

Silvia N Santalla, Clement Kanyinda-Malu and Rosa M de la Cruz

Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid, Avenida de la Universidad 30,  
28911 Leganés (Madrid), Spain

E-mail: [silvia.santalla@uc3m.es](mailto:silvia.santalla@uc3m.es)

Received 29 March 2007, in final form 6 June 2007

Published 6 July 2007

Online at [stacks.iop.org/Nano/18/315705](http://stacks.iop.org/Nano/18/315705)

## Abstract

Within the framework of the elasticity continuum theory in the linear approximation we have obtained the lattice parameter profiles for Ge/Si(001) and InAs/GaAs(001) quantum dots. In our model we assume that a small fraction of the substrate participates in heterostructure relaxation in the non-rigid approximation. Minimization of the free energy by the Euler–Lagrange method allow us to predict the evolution of the lattice parameter with the film coverage. A sigmoidal-like law for the lattice parameter profile is reached in the rigid and non-rigid substrate approximations. These results agree with x-ray diffraction measurements in the grazing schemes. As the aspect ratio changes, we observed a slight dependence of the lattice parameter slope, which can explain how the relaxation mechanism can affect the formation of quantum dots as the height to lateral dimensions are modified. From the results, we have deduced that the aspect ratio and the misfit strain significantly affect the relaxation processes, since they define changes in the lattice parameter as the height coverage increases.

## 1. Introduction

One of the most characteristic features of the Stranski–Krastanov (SK) growth mode in low-dimensional heterostructures is a distribution of semiconductor quantum dots (QDs) that are nearly homogeneous in their shapes and sizes. The uniformity of sizes and shapes could allow the achievement of good-quality optoelectronic devices. It is generally understood that the main mechanism of formation of QDs in thin solid films on solid substrates is the Asaro–Tiller–Grinfeld instability that releases epitaxial elastic stresses in the film caused by the crystal lattice mismatch between the film and the substrate [1]. The faceting instability of a thermodynamically unstable surface is another mechanism that can also play an important role in the formation of surface structures during epitaxial growth [2]. Both mechanisms lead to the formation of mounds that usually coarsen, with larger islands growing at the expense of smaller ones. In the coarsening process, the balance between the surface and elastic energies can lead to the formation of uniform-size islands as a preferred configuration having minimal energy. Additionally, mechanisms based on wetting interactions between the film and the substrate can ter-

minate coarsening of the surface structures. Boundary-layer and glued wetting-layer models for the last mechanism have been reported in the literature, where variation of the surface energy, misfit or lattice parameter with film height is considered [3–5].

Focusing on the lattice parameter, in order to explain the anomalous x-ray diffraction on InAs/GaAs quantum dots, Schüllli *et al* [6, 7] performed a fit of the diffraction curves where they assumed that the lattice parameter is allowed to relax monotonically from  $a_{\text{GaAs}}$  towards  $a_{\text{InAs}}$ . The resulting lattice parameter profile shows a sigmoidal-like behaviour as a function of the height above the substrate. On the other hand, Budiman and Ruda [8], in their analysis of the transition thickness, suggest that the lattice parameter of the film relaxes towards its bulk-like value. Dvurechenskii *et al* [9] measured the variation of the Ge lattice constant during conventional MBE of Ge on Si(100) and MBE with 100 eV Ge<sup>+</sup> pulsed ion beam actions. In both measurements, they clearly observed a sigmoidal-like behaviour beginning from the 2D-to-3D transition thickness and starting to saturate at around 10 monolayers of deposited Ge layers. In our previous works, we introduced the height-dependent lattice parameter in

a continuum model to predict the transition thickness [10] and related band-edge changes [11] due to that dependence. As reported therein [10, 11], these behaviours correctly describe the transition thickness, together with the band-edge changes due to the strain-height dependence. Indeed, this semi-empirical dependence was introduced as a good approximation of the lattice relaxation, in agreement with some observed experimental lattice misfit dependence with the height of the deposited film [12, 13]<sup>1</sup>. Other authors [14] reported a sigmoidal behaviour in the in-plane film strain for MgO films evaporated on a Ag(001) substrate. In studies of SK QD growth modes, many theoretical works have simulated the height profile or the strain distribution as a consequence of a constant-like misfit strain during the growth process, using various physical mechanisms. But, to our knowledge, no theoretical work has been reported on the evolution of the lattice parameter during this process.

Therefore, the aim of this work is to simulate the lattice parameter in typical semiconductor heterostructures like Ge/Si and InAs/GaAs as result of the elastic response induced by the misfit strain between the film and substrate materials. With the continuum elasticity theory in linear approximation, minimization of the total free energy by the Euler–Lagrange method leads to a couple of second-order differential equations with constant coefficients for the variation of the lattice parameter in the non-rigid approximation; the rigid substrate approximation provides a unique differential equation. Throughout all the calculations, we assume a small slope approach. Also, we suppose a coherent behaviour of the heterostructures at the film–substrate interface without taking into account the kinetic aspects of growth mechanisms.

With this purpose, the paper is organized as follows. In section 2, a brief description of the theoretical model is given, with special attention to Euler–Lagrange method. To emphasize this, we separate our model into two basic approximations: the non-rigid and the rigid substrate approximations. The former was introduced to account for the changes in the substrate materials created by the film coverage, while the latter supposes that all the misfit strain is located in the film during the growth process. The implementation of the model in Ge/Si and InAs/GaAs systems along with a discussion of the results are given in section 3. The main remarks and conclusion of this work will be given in section 4.

## 2. Theoretical model

The driving force for the self-organization processes during heteroepitaxial growth is the misfit between the crystal lattice of the growing layer and that of the substrate, which creates strain in the growing layer. During growth, elastic relaxation of the internal elastic energy may take place leading to self-organized nanostructures. Knowledge of the strain field is important for understanding the creation of an equilibrium dot shape, among other things. In general, two basic approaches are used both for the calculation of the strain distribution and for the shape and island profile simulations.

<sup>1</sup> Note: In Müller *et al* [12] the authors analyse the effective in-plane displacement oscillations; at the MBE characteristic growing temperature, this in-plane effective misfit follows a sigmoidal-like behaviour.

Those approaches consist of *continuum elasticity* and *atomistic simulations*. In the elasticity continuum theory, the structure under investigation is considered as an elastic continuum and the physical parameters under study are obtained by solving the elasticity equilibrium equations or by minimizing the elastic energy stored in the system. For our analysis, we will focus on the minimization of the density volume elastic energy. Let us denote by  $h(x, y)$  the deposited film thickness, i.e. the height profile, where  $(x, y)$  represent the coordinates of the planar film–substrate interface. To deduce the lattice parameter profile, we assume that all the changes are derived from the elastic density energy and we analyse both the non-rigid and the rigid substrate approximations.

Within the elasticity continuum theory in linear approximation, the elastic free energy density for a thin volume layer is expressed by [15]

$$f_e = \frac{1}{2} C_{ijkl} u_{ij} u_{kl} \quad (1)$$

where  $C_{ijkl}$  is the stiffness tensor and  $u_{ij}$  is the strain tensor defined in terms of the derivatives of the displacement vector  $\mathbf{u}$ , i.e.  $u_{ij} = u_{ji} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i)$ . In the following, we shall define the displacement vector components to account for the non-rigid and rigid substrate approximations, together with their related boundary conditions.

### 2.1. Non-rigid substrate approximation

In our previous works [10, 11] we introduced the basis of the non-rigid approximation. Indeed, in this approximation we assume that both the deposited film and the substrate are deformed by misfit strain, so that the elastic energy is stored in the film and in the substrate.

To represent this scheme, we define the film displacement vector components as:

$$\begin{aligned} u_{f1} &= \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right) x & u_{f2} &= \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right) y \\ u_{f3} &= h(x, y) \end{aligned}$$

and the same is done for the substrate leading to the following expressions:

$$\begin{aligned} u_{s1} &= \left( \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 \right) x & u_{s2} &= \left( \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 \right) y \\ u_{s3} &= k \end{aligned}$$

where  $k$  is a constant. In the above expressions,  $a_f(z)$  and  $a_s(z)$  represent the height-dependent lattice parameters of the film and substrate, respectively, while  $a_f$  and  $a_s$  denote their respective bulk values. For cubic crystals such as InAs, GaAs, Ge or Si, the unique non-zero stiffness constants are  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  and  $c_{44}$ . And the elastic free-energy density for any cubic system is given by

$$f = \frac{1}{2} c_{11} (u_{11}^2 + u_{22}^2 + u_{33}^2) + c_{12} (u_{11}u_{22} + u_{22}u_{33} + u_{33}u_{11}) + 2c_{44} (u_{12}^2 + u_{23}^2 + u_{31}^2)$$

so that the total free energy is given by:

$$\mathcal{F} = \int \int \int_V [f_f + f_s] dx dy dz \quad (2)$$

where the subscripts f and s refer to the film and substrate contribution, respectively, to the free-energy density. Accordingly, the strain tensor components read as:

$$\begin{aligned} u_{11}^f &= \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 & u_{12}^f &= 0 \\ u_{22}^f &= \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 & u_{23}^f &= \frac{1}{2} \left( \frac{a_f'(z)}{a_f} y + \partial_y h(x, y) \right) \\ u_{33}^f &= 0 & u_{31}^f &= \frac{1}{2} \left( \frac{a_f'(z)}{a_f} x + \partial_x h(x, y) \right) \end{aligned}$$

for the deposited film, and

$$\begin{aligned} u_{11}^s &= \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 & u_{12}^s &= 0 \\ u_{22}^s &= \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 & u_{23}^s &= \frac{1}{2} \frac{a_s'(z)}{a_s} y \\ u_{33}^s &= 0 & u_{31}^s &= \frac{1}{2} \frac{a_s'(z)}{a_s} x \end{aligned}$$

for the substrate. In the above relations, the prime refers to derivative with respect to the  $z$ -coordinate. Suppose that the slopes  $\partial_x h$  and  $\partial_y h$  take constant values in the small slope approximation. Since we are interested in the evolution of the lattice parameters with height, we may eliminate the  $x, y$  in-plane coordinate dependence in equation (2) by integrating the unit volume density strain-energy over the given area of the nanostructure, which represents the lateral dimensions of the systems. With this assumption, we obtain

$$\begin{aligned} F_f &= \int \int_{A \times B} f_f dx dy = AB (c_{11}^f + c_{12}^f) \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right)^2 \\ &+ \frac{1}{24} AB (A^2 + B^2) c_{44}^f \frac{a_f'(z)^2}{a_f^2} + \frac{1}{2} AB c_{44}^f (\partial_x h^2 + \partial_y h^2) \end{aligned} \quad (3)$$

inside the element of film and

$$\begin{aligned} F_s &= \int \int_{A \times B} f_s dx dy = AB (c_{11}^s + c_{12}^s) \left( \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 \right)^2 \\ &+ \frac{1}{24} AB (A^2 + B^2) c_{44}^s \frac{a_s'(z)^2}{a_s^2} \end{aligned} \quad (4)$$

for an element of the substrate, over the cross-section  $A \times B$  of the nanostructure. In equations (3) and (4), the superscripts f and s on the stiffness constants are used to denote the film and substrate materials, respectively. Then the total free energy is given by

$$F = \int_{-Z_s}^0 F_s dz + \int_0^{Z_f} F_f dz \quad (5)$$

assuming that the film–substrate interface lies at  $z = 0$  throughout our calculations. To calculate the lattice parameters, we use the Euler–Lagrange formalism, where we derive the differential equation that  $a(z)$  must obey in order to minimize the integral given in equation (5). Therefore, using the variational approach, the minimization of the total free energy gives rise to the following partial differential equation:

$$\frac{\delta F_j}{\delta a} = \frac{\partial F_j}{\partial a} - \frac{d}{dz} \frac{\partial F_j}{\partial a'} = 0 \quad (6)$$

where the functionals  $F_j(z, a_j(z), a_j'(z))$ , ( $j = f$  for the film and  $j = s$  for the substrate) are given by the right-hand terms

of equations (3) and (4) respectively. Applied to the film and substrate parts of the total free-energy density, we get two differential equations for the film and substrate, respectively:

$$a_f''(z) = 24 \frac{a_f (c_{11}^f + c_{12}^f)}{(A^2 + B^2) c_{44}^f} \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right) \quad (7)$$

and

$$a_s''(z) = 24 \frac{a_s (c_{11}^s + c_{12}^s)}{(A^2 + B^2) c_{44}^s} \left( \frac{a_s(z)}{a_s} - 1 \right). \quad (8)$$

Let us assume that the film-like differential equation for the lattice parameter profile is valid for  $z > 0$ , while the corresponding substrate equation is well defined for  $z < 0$ , with their respective solutions given by

$$a_f(z) = N_f \exp(\lambda_f z) + M_f \exp(-\lambda_f z) + a_f \quad (9)$$

for the film with the lattice decay or growth rate parameter given by:

$$\lambda_f = 2 \sqrt{\frac{6 (c_{11}^f + c_{12}^f)}{(A^2 + B^2) c_{44}^f}}$$

and

$$a_s(z) = N_s \exp(\lambda_s z) + M_s \exp(-\lambda_s z) + a_s \quad (10)$$

for the substrate, with

$$\lambda_s = 2 \sqrt{\frac{6 (c_{11}^s + c_{12}^s)}{(A^2 + B^2) c_{44}^s}}.$$

From these solutions, the total lattice parameter will be given by

$$a(z) = \Theta(-z) a_s(z) + \Theta(z) a_f(z),$$

where  $\Theta(z)$  (respectively  $\Theta(-z)$ ) is the Heaviside function introduced to account for the continuity of the lattice parameter at the film–substrate interface.  $N_f, M_f, N_s, M_s$  are constants which will be determined by boundary conditions.

Throughout this model, we assume that the deposited film relaxes towards its bulk lattice constant and that a small fraction of the substrate represented by  $Z_s = \alpha Z_f$  ( $\alpha < 1$ ) participates in the strain relaxation induced by the deposited film, after which it also recovers its bulk-like constant value. Therefore, far from the total film coverage ( $Z_f$ ), the above assumption gives rise to following boundary conditions applied to the non-rigid approximation, i.e.

$$a_s(-Z_s) = a_s \quad \lim_{z \rightarrow \infty} a_f(z) = a_f.$$

Also, we apply the coherence condition at the film–substrate interface, i.e.

$$a_s(0) = a_f(0) = a_i \quad a_s'(0) = a_f'(0),$$

with  $a_i$  the special value of  $a(z)$  at the interface. Finally, the constants are determined by

$$N_f = 0 \quad M_f = -a_f + a_i$$

$$N_s = -\frac{2(a_s - a_i) e^{\lambda_s Z_s}}{\sinh(\lambda_s Z_s)}$$



$$M_s = \frac{2(a_s - a_i)e^{-\lambda_s Z_s}}{\sinh(\lambda_s Z_s)}$$

and

$$a_i = \frac{\lambda_s a_s \cosh(\lambda_s Z_s) + \lambda_f a_f \sinh(\lambda_s Z_s)}{\lambda_s \cosh(\lambda_s Z_s) + \lambda_f \sinh(\lambda_s Z_s)}.$$

Using the above boundary conditions, together with the coherence interface condition, we get

$$a(z) = \Theta(-z) \left[ \frac{4(a_i - a_s)}{\sinh(\lambda_s Z_s)} \sinh(\lambda_s(z + Z_s)) + a_s \right] + \Theta(z) \left[ (a_i - a_f) \exp(-\lambda_f z) + a_f \right]$$

for the non-rigid approximation, where  $a_i$  is as previously defined. We will analyse the effect of the lateral dimensions on the lattice parameter profile for InAs/GaAs and Ge/Si nanostructures. Also, we study the role of the fraction of deformed substrate (represented by  $\alpha$ ) on the lattice parameter profile.

### 2.2. Rigid substrate approximation

Here again we recall the displacement vector components in the framework of the rigid approximation. Indeed, we shall mention that for this case the misfit-induced strain is stored only in the epilayer. Therefore, the displacement vector components vanish in the substrate, i.e. the deformation is defined throughout the following expression

$$u_{f1} = \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right) x \quad u_{f2} = \left( \frac{a_f(z)}{a_f} - 1 \right) y \\ u_{f3} = h(x, y).$$

The particular case of the rigid substrate approximation is basically identical to that of the non-rigid approximation, except that there is no deformation in the substrate. Then, using the given functional (equation (3)), the Euler–Lagrange formalism leads to the same differential equation for  $a(z)$  as that obtained in the former approximation.

Consequently, boundary conditions and interface limits are reduced to:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} a_f(z) = a_f \quad a_f(0) = a_s$$

leading to the following conditions

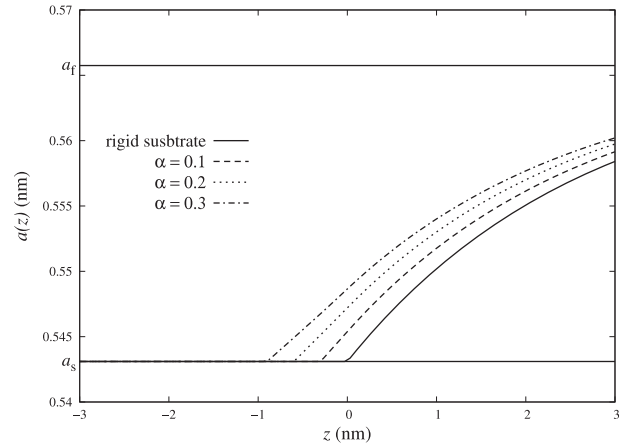
$$N_f = 0 \quad M_f = a_s - a_f$$

for the constants in the solution of the differential equation.

Combining those boundary and limit conditions, the lattice parameter profile is given by:

$$a(z) = \Theta(-z)a_s + \Theta(z) \left( (a_s - a_f) \exp(-\lambda_f z) + a_f \right) \quad (11)$$

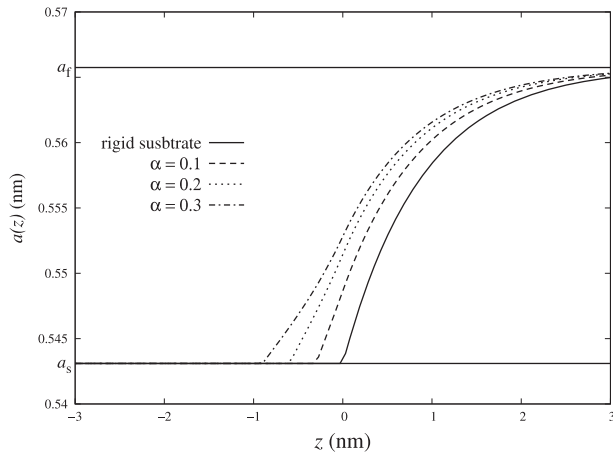
in the rigid substrate approximation. Note that the Heaviside function is introduced to account for the boundary condition at the film–substrate interface analogously to the case of the non-rigid approximation.



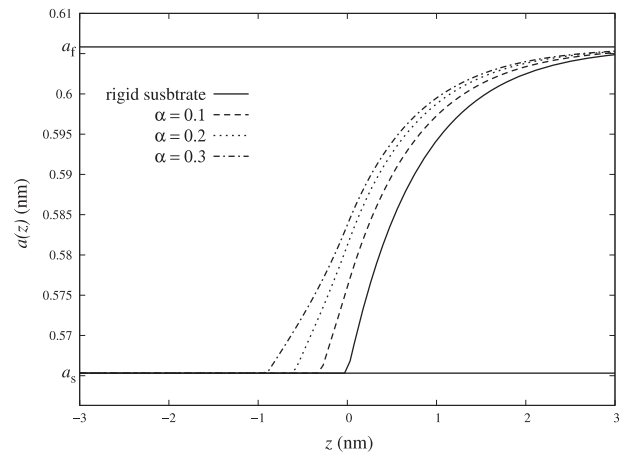
**Figure 1.** Lattice parameter profile as a function of film coverage in Ge/Si for three values of  $\alpha$  and for  $r = 0.2$ . The plot corresponding to the value  $\alpha = 0$  represents the rigid approximation results.

### 3. Results and discussion

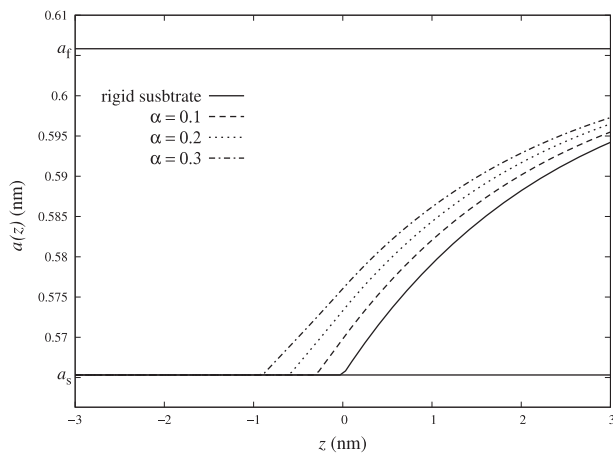
To illustrate our model, we represent the lattice parameter profile as a function of the film height for InAs/GaAs(001) and Ge/Si(001) heterostructures in both the rigid and non-rigid substrate approximations. Numerical results for the non-rigid approximations are depicted for three values of  $\alpha$ , known as a measure of the depleted or deformed zone in the substrate [10]. The values for the stiffness constants and the bulk lattice parameters of the constitutive materials are taken from [16]. With respect to the lateral dimensions ( $A$  and  $B$ ) and the film coverage ( $Z_f$ ), we restrict ourselves to typical data provided by MBE growth technique, where values of the aspect ratio ( $r \equiv h/A$ ) ranging between 0.3 and 0.7 [17] are reported. To simplify, we assume  $A = B$  for the lateral dimensions. This is done to compare the calculated data with the experimental results reported in the literature. Figures 1 and 2 represent the lattice profile of the Ge/Si QDs for two values of the aspect ratio; while figures 3 and 4 depict the lattice parameter for the InAs/GaAs QDs for similar values of  $\alpha$ . As expected, the non-rigid approximation simulates the rigid-one at  $\alpha = 0$ . All the obtained lattice parameter profiles follow the sigmoid-like behaviour both in the non-rigid and rigid approximations in good agreement with x-ray measurements [6, 7]. These authors have shown that the fact that the lattice parameter and the Ge content follow a same sigmoidal law explains the interdiffusion process as a basic phenomenon in Ge/Si QD formation. Also, as  $z \rightarrow \infty$ , the lattice parameters of the deposited film reach their asymptotic values, which are the bulk-like lattice parameters. In fact, for an aspect ratio value of  $r = 0.2$ , the rate of growth of the bulk-like value of the film is significantly slower than for  $r = 0.6$  in both Ge/Si and InAs/GaAs QDs. This could lead to the interpretation that the aspect ratio is one of key determinants of the lattice parameter profiles for the SK growth process. The values of  $\alpha$  and the aspect ratios affect the slope of the lattice parameter, which can define the change in the in-plane strain distribution. This behaviour is consistent with the changes observed in both the lateral lattice parameter and in the in-plane effective misfit in MBE growth experiments [9, 12].



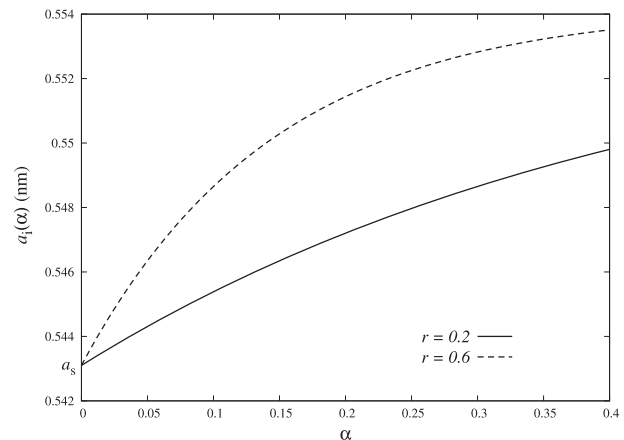
**Figure 2.** Lattice parameter profile as a function of film coverage in Ge/Si for three values of  $\alpha$  and for  $r = 0.6$ . The plot corresponding to the value  $\alpha = 0$  represents the rigid approximation results.



**Figure 4.** Lattice parameter profile as a function of film coverage in InAs/GaAs for three values of  $\alpha$  and for  $r = 0.6$ . The plot corresponding to the value  $\alpha = 0$  represents the rigid approximation results.



**Figure 3.** Lattice parameter profile as a function of film coverage in InAs/GaAs for three values of  $\alpha$  and for  $r = 0.2$ . The plot corresponding to the value  $\alpha = 0$  represents the rigid approximation results.



**Figure 5.** Interface lattice parameter profile as a function of  $\alpha$  in Ge/Si QDs for two values  $r = 0.2$  and  $r = 0.6$ .

Figure 5 shows the interface lattice parameter  $a_i$  as a function of  $\alpha$  for two selected values of  $r$  ( $r = 0.2$  and  $0.6$ ) in Ge/Si QDs. This value can be understood as a measurement of the slope of the lattice parameter. Although not shown here, a similar behaviour for the interface lattice parameter is obtained for InAs/GaAs QDs. This leads us to conclude that both the interface and the absolute lattice parameter follow a sigmoid-like behaviour in both materials.

#### 4. Conclusion

Lattice parameter profiles in Ge/Si(001) and InAs/GaAs(001) QDs are obtained within the elasticity continuum theory in a linear approximation. Minimization of the free energy by the Euler–Lagrange method allows us to predict the dependence of the lattice parameter on film coverage. Sigmoid-like behaviours for the lattice parameter profiles are obtained in the rigid and non-rigid approximations. These results agree with x-ray diffraction measurements. The aspect ratio and the

depleted zone into the substrate affect the slope of the lattice parameter, which can define the changes in the in-plane strain distribution.

#### References

- [1] Asaro J and Tiller W A 1972 *Metall. Trans.* **3** 1789
- [2] Grinfeld M Y 1986 *Sov. Phys.—Dokl.* **31** 831
- [3] Stewart J and Goldenfeld N 1992 *Phys. Rev. A* **46** 6505
- [4] Liu F and Metiu H 1993 *Phys. Rev. B* **48** 5808
- [5] Spencer B J 1999 *Phys. Rev. B* **59** 2011 and references therein
- [6] Golovin A A, Levine M S, Savina T V and Davis S H 2004 *Phys. Rev. B* **70** 235342
- [7] Sasaki A, Weber E R, Liliental-Weber Z, Ruvimov S, Washburn J and Nabetani Y 2000 *Thin Solid Films* **367** 277
- [8] <http://www.esrf.fr/UsersAndScience/Publications/Highlights/2002/Surfaces/SIS2/>
- [9] Schüllli T U, Sztucki M, Chamand V and Metzger T H 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 448
- [10] Budiman R A and Ruda H E 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 4586



- [9] Dvurechenskii A V, Smagina J V, Groetszchel R, Zinovyev V A, Armbister V A, Novikov P L, Teys S A and Gutavoskii A K 2005 *Surf. Coat. Technol.* **196** 25
- [10] See for example, Santalla S N, Kanyinda-Malu C and de la Cruz R M 2003 *J. Cryst. Growth* **253** 190
- [11] Santalla S N, Kanyinda-Malu C and de la Cruz R M 2005 *Physica E* **25** 456
- [12] Müller P, Turban P, Lapena L and Andrieu S 2001 *Surf. Sci.* **488** 52
- [13] Richard M I, Schulli T U, Wintersberger E, Renaud G and Bauer G 2006 *Thin Solid Films* **508** 213
- [14] Valeri S, Altieri A, di Bona A, Luches P, Giovanardi C and Moia T S 2002 *Surf. Sci.* **507–510** 311
- [15] Landau L D and Lifshitz E M 1986 *Theory of Elasticity* 3rd (revised) edn, vol 7 (Oxford: Pergamon) p 9
- [16] Landlot–Börstein 1982 *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* ed O Madelung (Berlin: Springer) p 63, 105, 299, 235
- [17] Grassi Alessi M, Capizzi M, Bhatti A S, Frova A, Materilli F, Frigeri P, Broacchi A and Franchi S 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7620

# Vertically extended Frenkel-Kontorova model: A real space renormalization group study

Javier Rodríguez-Laguna<sup>1</sup> and Silvia N. Santalla<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>*Departamento Física Teórica, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spain*

<sup>2</sup>*Departamento de Física, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés, Spain*

(Received 11 February 2005; revised manuscript received 27 June 2005; published 8 September 2005)

A modification of the Frenkel-Kontorova model is presented in which particles are allowed to move in the vertical direction. This model is used to study the formation of islands for a monolayer of 1D interfaces and the corresponding roughness transition. Both analytical and numerical approaches are employed, and the numerical algorithm is based upon real space renormalization group techniques.

DOI: [10.1103/PhysRevB.72.125412](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.125412)

PACS number(s): 68.35.Ct, 81.15.Hi, 05.10.Cc

## I. INTRODUCTION

The Frenkel-Kontorova (FK) model<sup>1,2</sup> was originally proposed by Frenkel and Kontorova in 1938 to study plastic deformations and twinning.<sup>3</sup> It was independently discovered by Frank and van der Merwe in 1949 to study 1D dislocations.<sup>4</sup> A rigid substrate is modeled by a sinusoidal potential, and film particles move within it making up a chain linked with harmonic springs of a given equilibrium length  $a_f$ . The period of the sinusoidal potential is assumed to be  $a_s=1$ . Given the horizontal positions of the film particles  $\{x_i\}_{i=1}^N$ , the system energy is

$$E[x_i] = \sum_{i=1}^N J_s \cos(2\pi x_i) + \sum_{i=1}^{N-1} J_f (x_{i+1} - x_i - a_f)^2. \quad (1)$$

At zero temperature this model presents a phase diagram in the variables  $J_f/J_s$  and  $a_f$  containing many tongues of commensurate phases separated by infinitesimal gaps of incommensurate structure.<sup>5-9</sup> These pathologies are removed at finite temperature,<sup>10</sup> but a continuous phase transition from a solid to a liquid-like structure remains with  $T_c > 0$ .

The FK model has been extended both to finite-width stripes<sup>11</sup> and truly 2D substrates.<sup>12</sup> More realistic interatomic potentials for the film interaction have been employed,<sup>13</sup> some of them with a phenomenological “temperature dependence” in order to study structural phase transitions.<sup>14</sup>

In this work the FK model is modified so as the film layer may curve, by allowing particles to displace vertically. Most methods of analysis of the classical FK model are not suitable in this case. Thus, we have resorted to a real space renormalization group (RG) numerical technique, inspired on the analysis of Griffiths and Chou<sup>5,15</sup> and the density matrix renormalization group (DMRG) technique.<sup>16</sup> The extension of the DMRG concepts to an area of application may be of interest to practitioners.

Heteroepitaxial surface growth, i.e., addition on a given crystalline substrate of particles of a different material with a given lattice mismatch, has recently attracted considerable technological interest.<sup>17,18</sup> When the lattice parameter is larger in the film than in the substrate, 3D islands may develop, making up quantum dots. There are three relevant growth modes: (a) Frank-van der Merwe (FvdM), consisting only of flat layers; (b) Stranski-Krastanov (SK), in which 3D islands grow on top of a flat *wetting layer*; and (c) Volmer-

Weber (VW), in which the 3D islands appear directly on the substrate.

Many theoretical models have been proposed, either within continuous elasticity theory<sup>19</sup> and atomistic models.<sup>20</sup> We will focus on the semiatomistic FK approach. It has been applied to study the mechanism of island formation both for 1D (Ref. 21) and 2D substrates with a realistic interatomic film potential.<sup>22</sup> For a given number of particles, if all monolayers cover completely the substrate, a FvdM growth mode is considered. If the particles are distributed in islands, leaving part of the substrate uncovered, a VW growth is assumed. Whenever a number of covering monolayers (i.e., a wetting layer) appears with islands on top of them, the growth mode is SK. In these works, no vertical deformation of a layer is allowed: each island consists of a given number of completely flat layers. This assumption is questionable in the SK case for the reason exposed in the following paragraph.

Let  $a_s$  and  $a_f$  be the substrate and film equilibrium lattice parameters, with  $a_f > a_s$ . Let us consider a wetting layer composed of flat monolayers with lattice parameters increasing upwards. The last monolayer, therefore, is less stressed than the first one. Thus, it is less likely to develop an islanding mechanism above it. The formation of a larger film surface has a certain energy cost, which would not have any counterpart. But this restriction disappears if all monolayers are allowed to bend. Consider a flat and a curved monolayer on the same substrate with the same number of atoms: the curved one must have larger atomic separation. Thus, the wetting layer height corresponds to the value where the extra energy needed to curve the film free surface is overcome by the reduction of the internal elastic energy provided by the effective *stretching* of all monolayers.

A first step in this direction is the analysis of the behavior of a single monolayer of film which is allowed to curve. This single monolayer may provide a seed for the future formation of islands when more monolayers are deposited.

The rest of this article is organized as follows. Section II discusses the vertically extended FK model. Section III provides some analytical insight into the solutions. Section IV presents the RG-like technique we have employed to get the minimum energy states and Sec. V discusses the numerical approach, along with the phase diagram for the model.

## II. MODEL

The original FK model splits the energy for each configuration of the film particles into two parts: the interaction between each deposited film particle and the substrate is represented using a continuous sinusoidal substrate potential, and interaction between nearest-neighbor particles of the film is considered to be harmonic.

This splitting is preserved in our extension, but with some modifications. First, film particles are allowed to displace in the direction orthogonal to the substrate. These vertical displacements should be inhibited by an appropriate increase in the substrate potential energy. Thus, the sinusoidal substrate potential must be transformed into a realistic 1+1D potential. Also, the interparticle film potential must be changed in accordance with the substrate in order to have the same long distance behavior. A harmonic film potential is not realistic: when two neighbor film particles get sufficiently far away, the interaction should be negligible.<sup>13</sup>

In our model the  $X$  axis shall be parallel to the substrate and the  $Z$  axis shall be orthogonal to it. Particle  $i$  has coordinates  $r_i = (x_i, z_i)$  and the configuration energy has the form:

$$E[\{r_i\}] = \sum_{i=1}^N V_s(r_i) + \sum_{i=1}^{N-1} V_f(|r_{i+1} - r_i|). \quad (2)$$

This model shall be referred to as vertically extended Frenkel-Kontorova (VEFK).<sup>23</sup> Our target in this work is to find the ground states, i.e., the global minimum energy configurations, and their properties.

### A. Film potential

Anharmonic film potentials for the FK model have been studied for a long time.<sup>13</sup> They must fulfill the following conditions: (a) as we get further away from the minimum, it should be harder to squeeze particles together than to separate them and (b) asymptotic freedom: particles should be free when their distance is large. There are many potentials fulfilling these conditions in the literature, and most details concerning them are irrelevant for the physics of our problem. We have chosen the Mie potential:<sup>28</sup>

$$V_f(d) = \frac{A_0}{\mu_f - \nu_f} \left[ \nu_f \left( \frac{a_f}{d} \right)^{\mu_f} - \mu_f \left( \frac{a_f}{d} \right)^{\nu_f} \right] \quad (3)$$

where  $d = |r_{i+1} - r_i|$  is the actual distance between neighboring film particles,  $a_f$  is their equilibrium distance,  $A_0$  is a constant and  $\mu_f > \nu_f$ . In this work,  $\mu_f = 12$  and  $\nu_f = 6$ , which correspond to a Lenard-Jones potential.

We define  $K_f$  to be the spring constant of small oscillations around the equilibrium point of the film potential. In terms of  $K_f$ , we find  $A_0 = K_f a_f^2 / \mu_f \nu_f$ .

### B. Substrate potential

The FK substrate potential is extended in the vertical ( $Z$ ) direction in such a way that it reduces to its previous sinusoidal form when  $z = z_{eq}$ , a given equilibrium value. Away from it, the potential is modified so as it is energetically favorable to stay at the equilibrium height, but not compul-

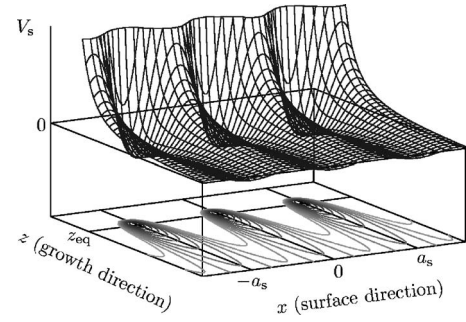


FIG. 1. Vertically extended Frenkel-Kontorova substrate potential.

sory. The equilibrium points of this potential must be arranged periodically at points  $(x, z) = (na_s, z_{eq})$ , where  $n \in \mathbb{Z}$  and  $a_s$  is the substrate lattice parameter, which we shall assume to be  $a_s = 1$  throughout this article.

The conditions on the height dependence of the substrate potential are similar to those for the film: (a) asymptotic freedom in the  $Z$  axis; (b) very high barrier at the substrate height. We propose the following form

$$V_s(x, z) = \frac{B_0}{\mu_s - \nu_s} \left\{ \nu_s \left( \frac{z_{eq}}{z} \right)^{\mu_s} - \mu_s \left( \frac{z_{eq}}{z} \right)^{\nu_s} \right. \\ \left. \times \frac{1}{2} \left[ \cos \left( \frac{2\pi x}{a_s} \right) + 1 \right] \right\} \quad (4)$$

where  $B_0$ ,  $\mu_s$ , and  $\nu_s$  are constants. The  $+1$  term by the cosine function makes the potential at  $z = z_{eq}$  zero on average. For  $z < z_{eq}$  this average value is positive, and it is negative, although tending to zero, for  $z > z_{eq}$ . This ensures that the ground state is always linked to the substrate. Figure 1 shows this potential for some typical values of the parameters. The potential may be seen to be large near the substrate and zero for large heights. There is an array of minima with their corresponding corridors, separated by potential barriers whose height decrease with  $z$ . The contour view, in the horizontal plane, depicts some ellipses whose centers correspond to these minima. We have chosen low values for the exponents:  $\mu_s = 4$  and  $\nu_s = 2$ , so as to have deeper corridors and a clearer phase transition.

The substrate particles creating this potential are arranged at coordinate points  $(x, z) = [(n + 1/2)a_s, 0]$ , as is depicted in Fig. 2. From the figure it is obvious that  $\theta_s \equiv \arctan(2z_{eq}/a_s)$ .

Let us consider a film particle staying close to a minimum of the substrate potential. From the Hessian matrix we may find the second derivative in the direction of  $\theta_s$ , toward one

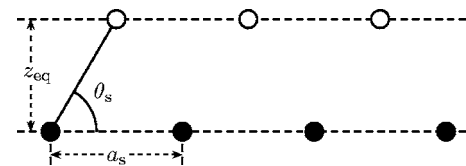


FIG. 2. Black and white dots represent the substrate particles and the substrate potential equilibrium positions, respectively.

of the substrate particles. If we relate this value to  $K_s$ , a spring constant for the substrate-film interaction, we find that

$$B_0 = K_s \frac{(\mu_s - \nu_s)(a_s^2 + 4z_{eq}^2)}{2\mu_s(\pi^2 + 2\mu_s\nu_s - 2\nu_s^2)}. \quad (5)$$

In the rest of this paper we shall assume  $a_s=1$  and  $z_{eq}=0.35$ . We define  $k \equiv K_f/K_s$ . In order to define the energy scale we assume  $K_s + K_f = 1$ .

### III. ANALYTICAL APPROACH

We are going to introduce an Ansatz which provides insight into the physics of the model. We shall consider all particles to have their  $x$ -coordinates in the equilibrium positions of the substrate potential. Furthermore, let us suppose that a fraction  $p$  of them leave the equilibrium plane  $z=z_{eq}$  and reach a new height value  $z_1$ . These particles shall be termed *runaway particles* and we shall assume them to be regularly spaced.<sup>29</sup> As a particular case, if  $p=1/2$  we get the *zigzag state*, in which every other particle leaves the equilibrium plane as a way to relax the film springs.

Let us consider the function  $e(z_1)$  to be the energy per particle minus the value for the flat configuration, for given values of  $p$ ,  $k$ , and  $a_f$ . Figure 3 (upper) shows this function for five values of  $k$ , with  $a_f=1.05$  and  $p=1/2$ . The first two cases,  $k < k_1$  and  $k = k_1 \approx 2.261$ , have a single minimum at  $z_1 = z_{eq}$ . Therefore, the ground state is flat. At  $k > k_1$  a second minimum appears at  $z_1 > z_{eq}$ . The ground state for the third curve, with  $k_1 < k < k_t \approx 2.905$ , is flat, but there is also a metastable rough state. At  $k = k_t \approx 2.905$  the two minima become equal. This point marks the *rugosity transition*. When  $k > k_t$  the ground state is rough, but the flat state is still metastable for some range in  $k$ . Figure 3 (lower) shows that this situation extends up to  $k = k_2 \approx 8.128$ , when the flat minimum becomes a saddle point. Beyond that value, for  $k > k_2$ , the flat state becomes unstable, and a new metastable state appears, with  $z_1 < z_{eq}$ . The true ground state is rough and has  $z_1 > z_{eq}$ .

Now let us consider the phase diagram, i.e., for each value of  $a_f$ , the value of  $k$  for which the two minima of the function  $e(z_1)$ , at  $z = z_{eq}$  and  $z_1 > z_{eq}$ , take the same energy. This transition curve  $k_t(a_f)$  is depicted in Fig. 4 with a full line. The lower curve shows  $k_1(a_f)$ , the values of  $k$  for which a second local minimum appears at  $z > z_{eq}$ . Between these two curves, there is a metastable rough state. The upper curve shows  $k_2(a_f)$ , the points where the flat state becomes unstable. Therefore, in the region between the transition curve and this line, the flat state is metastable.

The energy  $e(z_1)$  is proportional to  $p$ . Therefore,  $p$  plays an irrelevant role in the determination of the transition point. This means that, within this Ansatz, the phase transition is not a *truly* collective phenomenon. Since  $p=1/2$  is the maximum possible value of  $p$ , this Ansatz predicts that beyond the transition point the rough states will always be *zigzag* states.

The transition curve  $k_t(a_f)$  follows with good approximation a power law  $k_t \sim (a_f - 1)^\beta$  with two different exponents. For low values of  $a_f$  we have  $\beta \approx -1.30 \pm 0.02$ , and for high

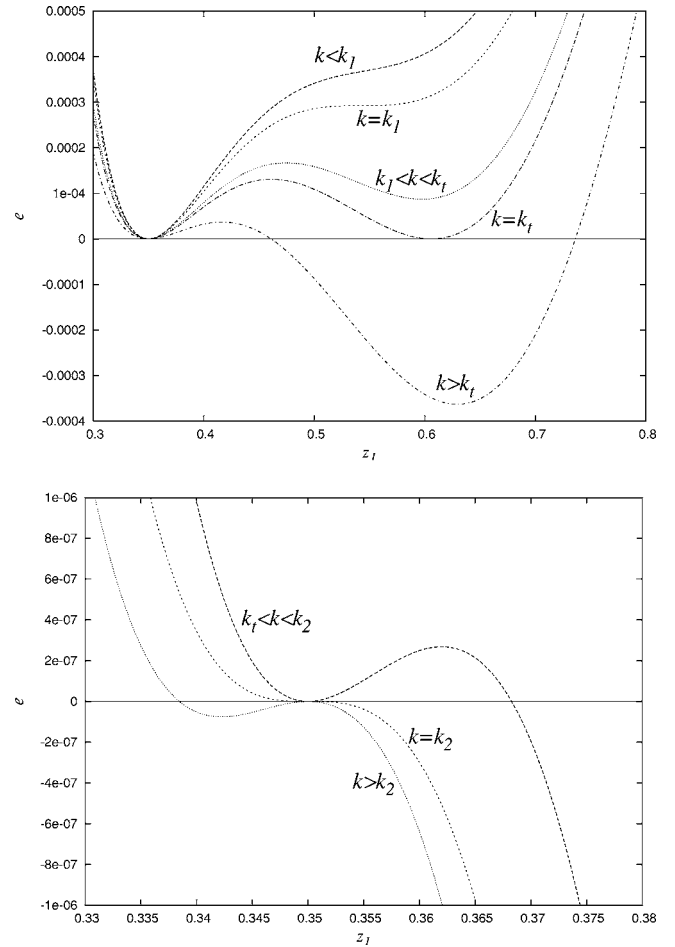


FIG. 3. Function  $e(z_1)$  (energy per particle minus the value for the flat configuration) within the Ansatz. The plots have different values of  $k$ , but they all take  $a_f=1.05$  and  $p=1/2$ . (Upper) The graphs illustrate the behavior of the energy around  $k_1$ , where a second (rough) minimum appears, and  $k_t$ , where the two minima become equal. (Lower) The graphs show the situation around  $k_2$ , where the first (flat) minimum becomes unstable.

values  $\beta \approx -1.94 \pm 0.02$ . The exponents are not universal: they depend on the exponents of the substrate and film potentials. We shall compare these results with the numerical ones.

Although this Ansatz is quite crude, it provides certainly some insight into the physics of the model. The basic framework, with a transition curve and the metastability regions, shall remain valid in the more accurate approach of Sec. V. We shall see that  $p=1/2$  is not the preferred state after the transition. The fraction of *runaway* particles plays a more relevant role when the atoms are allowed to move in the  $X$ -axis.

## IV. RENORMALIZATION GROUP PROCEDURE

### A. Formulation

The main procedure involved by real space RG is to rewrite the system equations in terms of block variables without altering their form. As it has been stated, our RG tech-

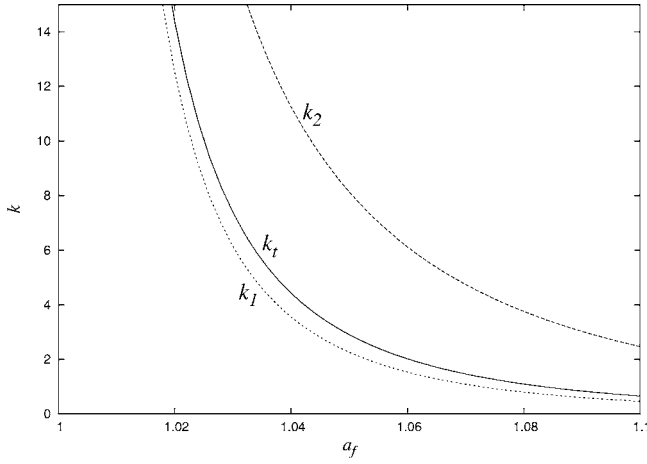


FIG. 4. Phase transition,  $k$  vs  $a_f$ , for the VEFK model within the Ansatz exposed in Sec. III. The full line labeled as  $k_t$  denotes the phase transition. Above that line, the ground state is rough. Below the  $k_1$  curve the ground state is flat. Between  $k_1$  and  $k_t$ , although the true ground state is flat, there is also a metastable rough state. Between  $k_t$  and  $k_2$ , the true ground state is rough, but the flat state is still metastable. Beyond  $k_2$ , the ground state is rough and the flat state is unstable.

nique is strongly inspired on the Griffiths and Chou<sup>5</sup> approach and the density matrix renormalization group (DMRG).<sup>16</sup>

A single particle moves within our 2D substrate potential,  $V_s$ , which we shall term  $V^{(1)}$  from now on. The particle stays at position  $r_1$ , and the system energy is  $V^{(1)}(r_1)$ . Let us add a second particle on (e.g.) the right side, and link them with the “spring”  $V_f(r_1, r_2)$ . The second particle shall remain fixed at any point  $r_2$  and we shall force the first particle to find its equilibrium position by minimizing  $V^{(1)}(r_1) + V_f(r_1, r_2)$ . Thus, we may write  $r_1 = f_{1 \leftarrow 2}(r_2)$  for a known  $f_{1 \leftarrow 2}$  function. The first particle will be said to be *enslaved* to the second one from now on, and function  $f_{1 \leftarrow 2}$  shall be called a *slaving mapping*.

Now, the total energy of the system may be expressed as:

$$V^{(2)}(r_2) \equiv V^{(1)}(r_1) + V_f(r_1, r_2) + V_s(r_2) = V^{(1)}[f_{1 \leftarrow 2}(r_2)] + V_f[f_{1 \leftarrow 2}(r_2), r_2] + V_s(r_2), \quad (6)$$

i.e., the total energy of the two-particles block depends only on the position of the second particle. Thus, it may be considered as an *effective* or *renormalized* potential. The minimum value of  $V^{(2)}$  is therefore the minimum possible energy for all the two-particles system. Minimizing for a single particle, we obtain the minimum for a two-particles chain.

The process may, of course, be iterated until a large chain is represented this way. If we have  $V^{(n-1)}(r_{n-1})$ , we may add an  $n$ th particle and find the value of  $r_{n-1}$  which minimizes  $V^{(n-1)}(r_{n-1}) + V_f(r_{n-1}, r_n)$  for each value of  $r_n$ . This is again a slaving relation:  $r_{n-1} = f_{n-1 \leftarrow n}(r_n)$ . The  $(n-1)$ th particle is now enslaved to the  $n$ th one. Now let us define  $V^{(n)}(r_n)$  as

$$V^{(n)}(r_n) \equiv V^{(n-1)}(r_{n-1}) + V_f(r_{n-1}, r_n) + V_s(r_n) = V^{(n-1)}[f_{n-1 \leftarrow n}(r_n)] + V_f[f_{n-1 \leftarrow n}(r_n), r_n] + V_s(r_n). \quad (7)$$

Using the same argument as before, the minimum value of  $V^{(n)}$  is the minimum possible energy for the whole chain.

### B. Reconstruction procedure

Let us suppose that we have carried out the previous procedure up to a given value of  $n$  and found the series of potentials  $V^{(1)}, \dots, V^{(n)}$ . We may reconstruct the ground state in this way. The value  $r_n^0$  which minimizes  $V^{(n)}(r_n)$  is the position of the  $n$ th particle in the ground state. When we have  $r_n^0$ , we may find  $r_{n-1}$  by minimizing

$$V^{(n-1)}(r_{n-1}) + V_f(r_{n-1}, r_n^0), \quad (8)$$

which is equivalent to the use of the enslaving function  $r_{n-1}^0 = f_{n-1 \leftarrow n}(r_n^0)$ . Iterating backwards we can find the position of the first particle:

$$r_1^0 = f_{1 \leftarrow 2}(f_{2 \leftarrow 3}(\dots [f_{n-1 \leftarrow n}(r_n^0)] \dots)), \quad (9)$$

and, thus, obtain the exact solution  $\{r_1^0, \dots, r_n^0\}$ .

Effectively, relation (7) may be expanded backwards, substituting  $V^{(n-1)}$  with its definition in terms of  $V^{(n-2)}$ , etc. Just as a check, we may evaluate  $V^{(n)}(r_n^0)$  and find

$$V^{(n)}(r_n^0) = V_s(r_n^0) + V_f(r_{n-1}^0, r_n^0) + \sum_{i=1}^{n-1} V_s(r_i^0) + \sum_{i=1}^{n-2} V_f(r_i^0, r_{i+1}^0), \quad (10)$$

which is, as it was already stated, the energy of the full chain in the ground state. Thus, the minimization equation for  $r_n$  within potential  $V^{(n)}$  solves the problem for the  $n$ -particles block, which is the essence of a real space RG method.

### C. Renormalization group flow and fixed points

We may consider  $V^{(i)}$  to be flowing under RG transformations in a certain functional space. Although the parameter space is infinite dimensional, this poses no special theoretical difficulties. All potentials are periodic in  $x$  with period  $a_s$ , since a block displacement of the full chain of  $a_s$  does not affect the energy, but they need not even be continuous. We will define a fixed point in this RG flow through the equation:

$$V^{(i)}(r) = V^{(i-1)}(r) + e. \quad (11)$$

The parameter  $e$  is just the energy per particle in the full chain. This fixed point equation may be rewritten as an eigenvalue equation within a minimax algebra<sup>24</sup> for a target potential  $R(r_i)$ :

$$R(r_i) = V_s(r_i) + \min_{r_{i-1}} [V_f(|r_i - r_{i-1}|) + R(r_{i-1})] + e. \quad (12)$$

If the flow took place in a finite-dimensional vector space, this equation would be sure to have a solution.<sup>24</sup> In our problem, despite the absence of a rigorous proof, we have found it to exist for a wide variety of cases. Solving Eq. (12) is a hard problem unless the RG procedure, starting with  $V^{(1)} = V_s$  converges. This convergence has always taken place in the cases we have tried.



If we are interested only in the thermodynamic limit, we may find the ground state from the fixed point potential  $R$ . The procedure is identical to the one described in the Sec. IV B but using always the same potential. If finite-size effects are thought to be important, the full series of potentials should be used.

## V. NUMERICAL APPROACH

The most straightforward strategy to obtain the ground state is to obtain the zero-force equations for each particle, solve them and choose the solution with lowest energy. The equation for  $r_i$  depends both on  $r_{i-1}$  and  $r_{i+1}$ . This yields a dynamical system which, for the original FK model, is related to the *standard map*. A minimization algorithm must be used to choose the orbit which corresponds to the minimum energy. In our case, this strategy is not appropriate, since it is not possible to solve analytically the  $i$ th zero-force equation for  $r_{i+1}$ , as it is in the original FK model. Therefore, the numerical approach shall be based on global minimization techniques, whose problem is the existence of a complex landscape of local minima.

In order to obtain a good seed configuration to insert in a global numerical minimization routine, we have tried several different algorithms: (a) Simulated annealing<sup>25</sup> (b) take a small chain and find its ground state; after that, add a site both at the left and the right borders and repeat the procedure until the desired length is reached; (c) a technique based on the puncture renormalization group;<sup>26</sup> start with any initial configuration, pick up a *block* of sites and minimize its energy while the left and right tails may only move as two solid blocks; afterwards, the chosen block moves right and left, *sweeping* the system; and (d) the RG method described in Sec. IV whose implementation we are going to detail.

Method (d) has always provided the lowest energy minima, for reasons which will be discussed in the following paragraph. The other three methods give, in many cases, higher energy local minima. Method (b) is the second best, and its main handicap is that its solutions tend to have too much left-right symmetry. It is always convenient to optimize the solution found using a classical minimization algorithm.<sup>30</sup>

### A. Technical details

The procedure described in Sec. IV may not be carried out analytically. Our numerical implementation discretizes each  $V^{(i)}$  into a regular grid of  $N_x \times N_z$  points, typically  $100 \times 100$  or  $100 \times 150$  points. The discretization interval of the potential is an important issue. We have found the election  $[-a_s/2, a_s/2] \times [z_{eq}/2, 5z_{eq}/2]$  to be appropriate. The  $X$  interval is motivated by the  $a_s$  periodicity of all potentials. In the  $Z$  axis, the interval is designed to include all runaway particles.

In their seminal work, Griffiths and Chou<sup>5</sup> obtain the *minimum enthalpy* state instead of the minimum energy one. This means that, in our case, the film potential would be changed into

$$V_f^*(r_1, r_2) \equiv \min_m V_f(|r_1 - r_2 + m \cdot e_x|) \quad (13)$$

where  $e_x$  is the unit vector in the  $X$  direction and  $m$  is an integer. This change is made so as the search for the minimum in the construction of  $V^{(n+1)}$  from  $V^{(n)}$  has a solution in the  $[-a_s, a_s]$  interval of the  $X$  axis. Otherwise, the search should be extended to the whole real line. We have found an alternative approach to this problem. The search is carried out on *two* periods in the  $X$  axis on the left side of the  $(n+1)$ th particle. Since  $a_f < 2a_s$  in all the studied cases, this procedure is sure to find the solution. Our solution is always optimal within the subspace of coarse-grained potentials on the given grid.

Our calculations are of two types: *infinite systems*, i.e., systems in the thermodynamical limit, and *finite-size systems*. The differences between them shall be analyzed in the following sections.

For each value of  $a_f$  and  $k = K_f/K_s$  the ground state is found. For each ground state the following observables are considered: (a) energy per particle  $e$ , (b) average height  $h \equiv \langle z \rangle$  and its standard deviation  $\sigma_h$ , known as *roughness*, and (c) effective lattice parameter  $\alpha$ , defined as the average of  $|x_{i+1} - x_i|$ , and its standard deviation  $\sigma_\alpha$ .

### B. Roughness transition: Infinite systems

For any given value of  $a_f$ , the value  $k = K_f/K_s = 0$  always results in a flat configuration, with  $h = z_{eq}$  and  $\alpha = a_s$ . If we increase  $k$ , all the observables increase smoothly up to a certain value  $k_t(a_f)$ , where an abrupt jump takes place.

The infinite system computation starts with the application of the RG flow on the substrate potential  $V_s$  in order to find the fixed point potential  $R(r)$ . Typically, about 10 or 20 iterations were enough to get a maximum error of a part in  $10^6$ . This fixed point potential yields a unique enslaving function,  $f$ . We obtain the point where  $R(r)$  takes its minimum value,  $r_1^0$ , and iterate the enslaving function on it so as to reconstruct the full ground state  $\{r_1^0, r_2^0, \dots, r_N^0\}$  for a large value of  $N$ . If, for a given tolerance, there is a value  $N_0$  such that if  $n > N_0$ ,  $z_n \approx z_{eq}$ , we shall assume that the ground state is flat. We have chosen a tolerance of  $10^{-4}$ .

The phase transition obtained with this criterion is shown in Fig. 5. The first part, up to  $a_f \approx 1.075$ , may be fitted to  $k_t(a_f) \sim (a_f - 1)^\beta$  with  $\beta \approx -1.39$ , in reasonable agreement with the value  $-1.30 \pm 0.02$  obtained for the analytical Ansatz. For high values of  $a_f$  the transition curve is more rough, and the fit is more difficult. Nonetheless, the exponent may be seen to increase in absolute value.

The transition always takes place at a higher value of  $k$  than in the analytical Ansatz. This is due to the fact that particles were not allowed in that case to move in the equilibrium plane. This way to relax stress delays the transition in practice.

According to the results of Sec. III, for most points just above the transition the ground state is a *zigzag* state, i.e., the fraction of *runaway particles* is either  $p = 1/2$  or  $p = 1$ .

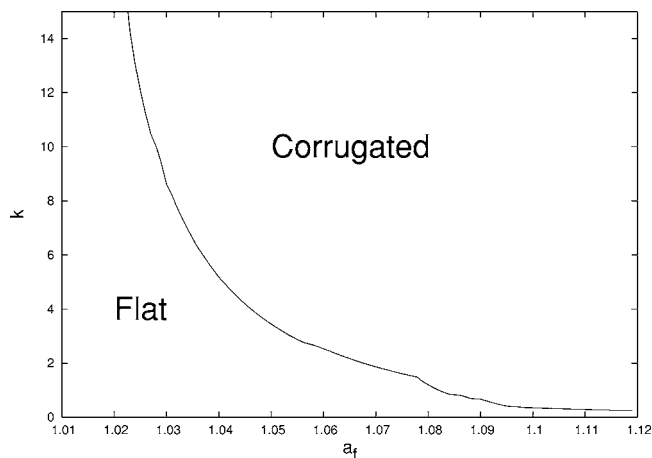


FIG. 5. Phase diagram for the VEFK model in the thermodynamical limit.

### C. Roughness transition: Finite-size systems

Finite-size systems present interesting peculiarities. Whenever an island develops and new film particles are deposited on it, the size of the island renders the thermodynamical limit irrelevant. Therefore, finite-size effects might play an important role in practical applications. We have mapped and analyzed the roughness transition for a finite-size system with  $N=101$  particles.

In these calculations, the intermediate potentials of the RG flow are stored to disk so as they may be recovered during the reconstruction procedure. When convergence is attained, the program stops calculating any more potentials and assumes the rest to be equal to the last one in storage.

The positions of the particles always belong to the  $N_x \times N_z$  grid. Therefore, their precision is low. In the finite-size case the positions entered a standard minimization algorithm. Usually, this procedure only took a very short time, since the configuration was nearly optimal and its deviation was only due to the effect of the lattice. Checks were periodically made to ensure that the energy per particle in our results were lower than in the other approaches described at the beginning of this section.

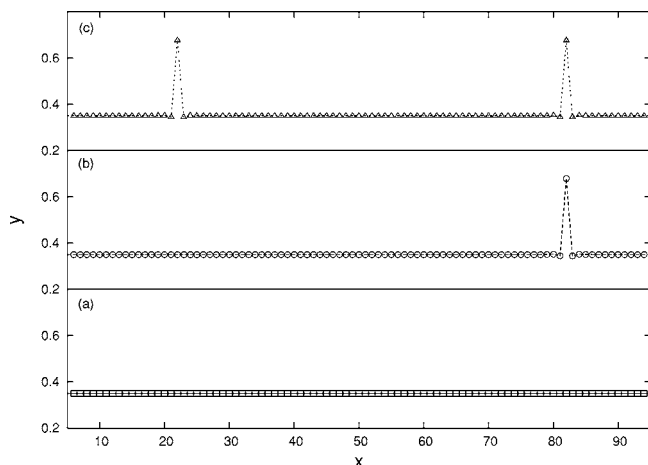


FIG. 6. For 101 particles and  $a_f=1.03$ , ground states with (a)  $k=3.046\ 70$ ; (b)  $k=3.046\ 74$ ; and (c)  $k=3.046\ 78$ .

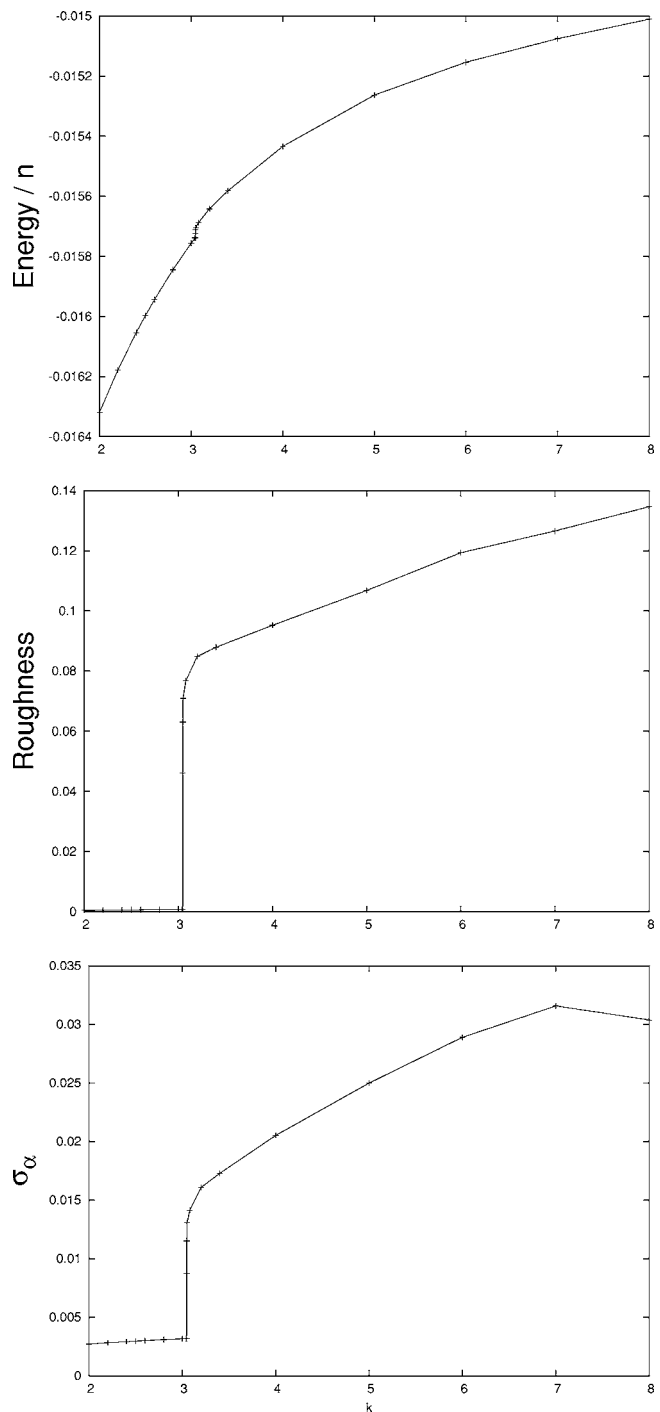


FIG. 7. Transition in three observables: (upper) the energy per particle, which has a small jump; (middle) the roughness, which has a jump of 2 orders of magnitude; (bottom) the deviation in the effective lattice parameter, which also shows a jump. The roughness was the guide to find the transition.

Figure 6 shows three ground states with  $a_f=1.03$  and  $k=3.046\ 70$ ,  $3.046\ 74$  and  $3.046\ 78$  for  $N=101$  particles. The first one is flat. In the second one, a single runaway particle appears. In the third one, two symmetrically placed particles leave the equilibrium plane  $z=z_{eq}$ . The values of  $\sigma_h$  increase from  $7 \times 10^{-4}$  to 0.032 and 0.045, respectively, in a very

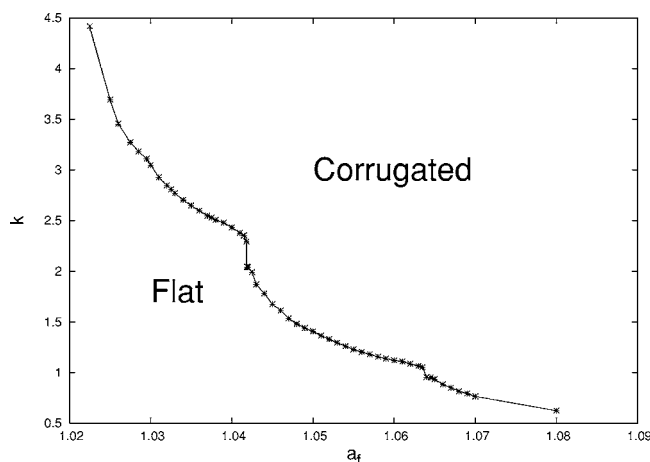


FIG. 8. Phase diagram for the VEFK model with  $N=101$  particles. Above the line, the ground states are always rough, and below they are flat. The phase border may be seen to have jumps at certain positions.

small interval for  $k$ . As we increase  $k$ , new peaks appear steadily, in a slower way.

Figure 7 shows the behavior of the energy per particle  $e$ , roughness  $\sigma_h$  and deviation of the effective lattice parameter  $\sigma_\alpha$  for  $a_f=1.03$  as we increase  $k$ . The transition is clearly seen to coincide for the three observables.

For each value of  $k$  and  $a_f$  a certain *flat domain-size*  $D$  may be defined as the minimum distance between runaway particles, or between runaway particles and the extreme of the chain. Of course, a ground state is rough whenever  $D < N$ .

Figure 8 shows the phase transition curve in the  $k$ - $a_f$  plane for  $N=101$ . This curve presents some jumps, e.g., at  $a_f=1.0418$  between  $k \approx 2.04$  and  $2.28$ , which are finite size effects. At this special jump, the domain size is  $D=50$ , i.e., half the system size. Thus, the first particle to leave the equilibrium plane is the central one. This behavior is *locked* for a certain range of  $k$  values. The second jump in size is at  $a_f=1.064$ , and there the domain size is  $D=34$ , i.e., very close to one third of the total lattice size. This locking is a collective phenomenon which does not appear in our analytical Ansatz.

This behavior is clearly different from the one we have found for infinite systems. Border effects are clearly dominant in the phase transition for finite systems.

## VI. CONCLUSIONS AND FURTHER WORK

A modification of the classical FK model, known as vertically extended Frenkel-Kontorova (VEFK), has been proposed in which particles may displace vertically, thus allowing the film layer to bend. Physical pathologies associated with the FK model, such as the sharp commensurate-

incommensurate transition, disappear in this case. This modified model is used to study a roughness transition which might be the seed for island formation in surface growth phenomena, both with analytical and numerical approaches, at  $T=0$ . The numerical technique is inspired on the effective potentials method of Chou and Griffiths<sup>5</sup> and on real space renormalization group methods, specially on DMRG. The analytical approach shows both a transition curve and two broad metastability regions.

This roughness transition presents some general features: (a) it starts with some runaway particles which leave the equilibrium plane; (b) the size of the flat regions (domains) near the transition point depends on the parameters  $a_f$  and  $k$ , and is rather sensitive to finite size effects.

As discussed at the introduction, rough configurations may be the origin of domains which make up the characteristic islands in SK and VW growth modes. The effect of many film monolayers is, of course, of great importance, and has been left for further work. A second monolayer may have a qualitative effect on the transition.

All the surface growth phenomena are, of course, 2+1D. The dimensional extension of our model involves some numerical difficulties, since there does not exist a straightforward extension of the RG approach. The performance of DMRG-like techniques decrease when the particle linking graph does not have a tree topology. Extensions of the DMRG algorithm to 2D and 3D problems are a field of active research<sup>26,27</sup> and this problem might well pose a possible application for them.

This VEFK model may be studied at finite temperature with the transfer matrix formalism. The usual arguments against 1D phase transitions do not apply in this case, since the substrate potential imposes a long range order. Therefore, the roughness transition is likely to survive up to a finite value of  $T$ . A positive result in this direction is the treatment of a finite temperature transition for FK.

In physical terms, there should be a second *flatness transition* at even higher values of  $k=K_f/K_s$ , for which the film gets flat again, with the effective lattice parameter  $\alpha=a_f$ . In our numerical analyses this second transition does not appear. The reason is the following: at very high values of  $k$  the substrate potential is almost nonexistent, and the reference plane for the film disappears in practice. All configurations in which each particle is at a distance  $a_f$  from its neighbors, even if it is highly curved, have nearly the same energy.

Some relevant features, such as a slowly changing curvature or the second flatness transition, would be met if a three-body angular potential was included. This extension is physically plausible and may lead to a richer phase diagram.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors have benefited from very useful discussions with A. Degenhard, R. Cuerno, and M.A. Martín-Delgado.



\*Email address: ssantall@fis.uc3m.es; URL: <http://moria.uc3m.es/~noema>

- <sup>1</sup>O. M. Braun and Y. S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova Model* (Springer, New York, 2004).
- <sup>2</sup>P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1995).
- <sup>3</sup>J. Frenkel and T. Kontorova, Phys. Z. Sowjetunion **13**, 1 (1938); J. Phys. (USSR) **1**, 137 (1939).
- <sup>4</sup>F. C. Frank and J. H. van der Merwe, Proc. R. Soc. London, Ser. A **198**, 205 (1949); **198**, 216 (1949); **200**, 125 (1949); **201**, 261 (1950).
- <sup>5</sup>W. Chou and B. Griffiths, Phys. Rev. B **34**, 9, 6219 (1986).
- <sup>6</sup>S. Aubry, Physica D **7**, 240 (1983); J. Phys. C **16**, 2497 (1983); J. Phys. (Paris) **44**, 147 (1983).
- <sup>7</sup>M. Peyrard and S. Aubry, J. Phys. C **16**, 1593 (1983).
- <sup>8</sup>O. Biham and D. Mukamel, Phys. Rev. A **39**, 5326 (1989).
- <sup>9</sup>S. C. Ying, Phys. Rev. B **3**, 4160 (1971).
- <sup>10</sup>J. E. Sacco, A. Widom, and J. B. Sokoloff, J. Stat. Phys. **21**, 497 (1979).
- <sup>11</sup>O. M. Braun and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. B **44**, 7694 (1991).
- <sup>12</sup>P. Bak, D. Mukamel, J. Villain, and K. Wentowsaka, Phys. Rev. B **19**, 1610 (1979).
- <sup>13</sup>I. Markov and A. Trayanov, J. Phys. C **21**, 2475 (1988); J. Phys.: Condens. Matter **2**, 6965 (1990).
- <sup>14</sup>S. Little and A. Zangwill, Phys. Rev. B **46**, 7981 (1992); **49**, 16659 (1994).
- <sup>15</sup>W. Chou, J. Stat. Phys. **50**, 207 (1988).
- <sup>16</sup>*Density Matrix Renormalization*, edited by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg (Springer, New York, 1998).
- <sup>17</sup>D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures* (Wiley, New York, 1999).
- <sup>18</sup>I. Daruka and A.-L. Barabási, Phys. Rev. Lett. **79**, 3708 (1997).
- <sup>19</sup>V. A. Shchukin and D. Bimberg, Rev. Mod. Phys. **71**, 1125 (1999).
- <sup>20</sup>A.-L. Barabási, Appl. Phys. Lett. **70**, 2565 (1997).
- <sup>21</sup>C. Ratsch and A. Zangwill, Surf. Sci. **293**, 123 (1993).
- <sup>22</sup>E. Korutcheva, A. M. Turiel, and I. Markov, Phys. Rev. B **61**, 24, 16890 (2000).
- <sup>23</sup>S. N. Santalla, J. Rodríguez-Laguna, C. Kanyinda-Malu, and R. M. de la Cruz, poster at the conference *Trends in Nanotechnology*, Salamanca (Spain), 2003. Available at <http://moria.uc3m.es/~noema/investigacion/semiatomistico.html>
- <sup>24</sup>R. A. Cunninghame-Green, *Minimax Algebra* (Springer, New York, 1979).
- <sup>25</sup>W. H. Press *et al.*, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1997).
- <sup>26</sup>M. A. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna, and G. Sierra, Nucl. Phys. B **601**, 569 (2001).
- <sup>27</sup>See talks from the *Density Matrix Renormalization Meeting*, Leiden, August 2004 at <http://dmrg.info/workshop>.
- <sup>28</sup>Other potentials with similar features, such as the Morse potential or the one proposed by Markov *et al.* (Ref. 13), give the same qualitative physics.
- <sup>29</sup>Requirement of regular spacing for the runaway particles is not important within this Ansatz, i.e., their distribution may be random as far as there are not neighbor. This is not true in the general case.
- <sup>30</sup>A conjugate gradient search with Polak-Ribiere modification (Ref. 25).

## PUBLICACIONES

---

Indicar volumen, páginas inicial y final (año) y clave.

CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = review, E = editor.

---

1. AUTORES (p.o. de firma): A. Dobado and **S.N. Santalla**. (orden alfabético)  
TÍTULO: *Pion gas viscosity at low temperature and density*.  
REVISTA: Physical Review D, **65**, 096011–096023 (2002), (hep-ph/0112299) CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 4.358

---
  2. AUTORES (p.o. de firma): **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: *Coherent growth of InAs/GaAs self-assembled quantum dots*.  
REVISTA: Physica E, **17**, 480–483 (2003). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 0.930

---
  3. AUTORES (p.o. de firma): **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: *Stranski–Krastanov growth mode in Ge/Si(001) self-assembled quantum dots*.  
REVISTA: Journal of Crystal Growth, **253**, 190–197 (2003). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 1.414

---
  4. AUTORES (p.o. de firma): **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: *Substrate orientation effects on the Stranski–Kartanov growth mode*.  
REVISTA: Nanotechnology, **15**, S215–S219 (2004). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 3.322

---
  5. AUTORES (p.o. de firma): A. Degenhard, J. Rodríguez-Laguna, **S.N. Santalla**. (orden alfabético)  
TÍTULO: *Density matrix renormalization group approach to non-equilibrium phenomena*  
REVISTA: Multiscale Modeling and Simulation (SIAM) **3** 89–105 (2004). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 1.135

---
  6. AUTORES (p.o. de firma): **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: *Islanding mechanism and band edges in InAs/GaAs(11n) nanostructures*  
REVISTA: Physica E, **25**, 456–465 (2005). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 0.946

---
  7. AUTORES (p.o. de firma): J. Rodríguez-Laguna and **S.N. Santalla**. (orden alfabético)  
TÍTULO: *Vertically extended Frenkel-Kontorova model: a real space renormalization group study*.  
REVISTA: Physical Review B, **72**, 125412 1–8 (2005) (cond-mat/0502178) CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO: 3.185

---
  8. AUTORES (p.o. de firma): **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: *On the lattice parameter profiles in the Stranski–Krastanov growth mode*  
REVISTA: Nanotechnology, **18**, 315705 1–6 (2007). CLAVE: **A**  
FACTOR DE IMPACTO:

---
-



## CONTRIBUCIONES A CONGRESOS

---

1. AUTORES: J. Rodríguez Laguna y **S.N. Santalla**.  
TÍTULO: **Evolución de un filamento cerrado en flujos bidimensionales**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster  
CONGRESO: *X Congreso de Física Estadística, FisEs 2000*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España). AÑO: 21–23/09/2000

---
2. AUTORES: **S.N. Santalla** y A. Dobado.  
TÍTULO: **Sobre la descripción hidrodinámica del gas de piones en colisiones de iones pesados**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster  
CONGRESO: *X Congreso de Física Estadística, FisEs 2000*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España). AÑO: 21–23/09/2000

---
3. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Generalized Relaxation Model of Coherent Inland Formation in Stranski–Krastanov Growth Model**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology*.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Segovia (España). AÑO: 3–7/09/2001

---
4. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Transition Thickness in Coherent Islanding of semiconductor heteroepitaxy**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral.  
CONGRESO: *COST joint Work Group meeting on “Individual and Assembled Nanoparticles and Quantum Dots”(IANQ)*.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Leuven (Bélgica). AÑO: 25–27/04/2002

---
5. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Puntos cuánticos auto-organizados III-V**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral.  
CONGRESO: *1 Reunión Nacional de Nanociencia*.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid (España). AÑO: 25–27/04/2002

---
6. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Coherent growth of InAs/GaAs selft-assembled quantum dots**.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral.  
CONGRESO: *Internatinal conference on superlattices nano-structures and nano-devices*.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toulouse (Francia). AÑO: 22–26/07/2002

---

- 
7. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Rigid and non-rigid substrate approximations in the Stranski-Krastanov coherent growth mode.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela (España). AÑO: 9–13/09/2002
- 
8. AUTORES: A. Degenhard, J. Rodríguez-Laguna, **S.N. Santalla**.  
TÍTULO: **A Density Matrix Renormalization Group Approach to Non-Equilibrium Phenomena.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral.  
CONGRESO: *Invariance and Model Reduction for Multiscale Phenomena.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zürich (Switzerland). AÑO: 26–29/08/2003
- 
9. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Substrate orientation effects on the Stranski-Krastanov growth mode.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Salamanca (España). AÑO: 15–19/09/2003
- 
10. AUTORES: **S.N. Santalla**, J. Rodríguez Laguna, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **A study of Stranski-Krastanov growth mode using a modified Frenkel-Kontorova model.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Salamanca (España). AÑO: 15–19/09/2003
- 
11. AUTORES: C. Kanyinda-Malu, **S.N. Santalla** y R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Estudio teórico de mecanismos de crecimiento y propiedades electrónicas en puntos cuánticos semiconductores.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Reunión Nacional de Nanociencia.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (España). AÑO: 26–28/11/2003
- 
12. AUTORES: C. Kanyinda-Malu, **S.N. Santalla** and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Growth mechanisms and electronic properties in semiconductors quantum dots.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *1st NanoSpain Workshop.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Sebastian (España). AÑO: 10–12/03/2004
-

- 
13. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **Islanding mechanism and band edges in InAs/GaAs(11n) nanostructures.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Segovia (España). AÑO: 13–17/09/2004
- 
14. AUTORES: **S.N. Santalla**, C. Kanyinda-Malu and R.M. de la Cruz.  
TÍTULO: **On the lattice parameter and height profiles in the Stranski–Krastanov growth mode.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster.  
CONGRESO: *Trends in Nanotechnology.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Grenoble (Francia). AÑO: 04–08/09/2006
- 
15. AUTORES: R.M. de la Cruz, **S.N. Santalla** and C. Kanyinda-Malu.  
TÍTULO: **Characterization of coherent growth in semiconductor quantum dots.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.  
CONGRESO: *19- Workshop: Physical and Chemical Properties in Nanoclusters.*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Avila (España). AÑO: 25–27/09/2006
-